现代物理基础丛书 52

高等量子力学

汪克林 著

科学出版社

(O-5037.0101)

www.sciencep.com



科学出版中心 数理分社
电 话：(010) 64033664
E-mail：math-phy@mail.sciencep.com
网 址：http://www.math-phy.cn

销售分类建议：高等物理

定 价：69.00 元

现代物理基础丛书　52

高等量子力学

汪克林　著

科学出版社
北京

内 容 简 介

本书共分八章，介绍了二次量子化、相对论量子理论方程、角动量、动力学的路径积分形式、散射理论以及粒子的电磁作用等内容，此外还增加了在目前前沿研究中有广泛应用价值的含时问题和相干态，高等量子力学与大学阶段的量子力学之间的关系颇似理论物理之于普通物理. 高等量子力学课程的讲解应着重于从原理出发进行演绎的推理，因此本书力求做到全书内容相互呼应. 本书还增加了一些新内容及新的讲解方法，例如角动量一章就是用角动量的玻色化理论进行讲解.

本书可用作物理类研究生的教科书或参考书，对从事物理学研究的科研人员亦有一定的参考价值.

图书在版编目(CIP)数据

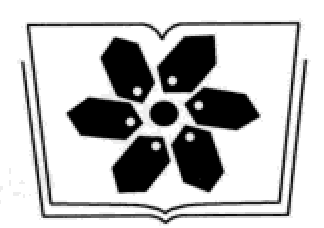
高等量子力学/汪克林著. —北京：科学出版社，2013
(现代物理基础丛书)
ISBN 978-7-03-036677-1

Ⅰ.①高… Ⅱ.①汪… Ⅲ.①量子力学 Ⅳ.①O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 026799 号

责任编辑：钱 俊 周 涵 / 责任校对：彭 涛
责任印制：钱玉芬 / 封面设计：陈 敬

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com
骏杰印刷厂印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2013 年 3 月第 一 版 开本：B5(720×1000)
2013 年 3 月第一次印刷 印张：15 3/4
字数：300 000
定价：69.00 元
(如有印装质量问题，我社负责调换)



中国科学院科学出版基金资助出版





前　　言

二十世纪八九十年代中国科技大学物理系的夏上达教授给高能物理专业以外的物理类研究生讲授量子力学课程.在这段时间里当他不在学校时我代为讲授.在几次讲授过程中我深切地感到他对这一课程的选材很适合这些研究生的学习要求和今后科研工作的需要,但同时也感到在此基础上撰写一本相应教材的迫切性.

高等量子力学是物理类研究生的必修专业基础理论课程.它既是基础理论知识的扩展和提升,又是从基础理论到研究前沿的中间桥梁.因此,这一课程既要对固有的基础理论作更深入的讨论和讲解,又需要注意培养学生提出问题和解决问题的能力.这就要求在高等量子力学的教科书中一方面要有固有的理论体系,另一方面又要包含量子理论的最新进展,让学生们认识到量子理论远非完备,还有继续发展的空间.本书将努力把这两部分内容有机地融合在一起,明确强调量子理论继续发展的前景.

按照以上的撰写目的,作者在书中力求把所有的内容组织成一个系统的并具有一定特点的理论体系——这本来就是高等量子力学这门课程应该追求的一个目标.一般地,高能物理和粒子理论专业以外的研究生在学习了高等量子力学课程后,若再掌握一些本研究领域的相关知识,便可直接着手他们的研究课题了.本书中作者尽量以探讨的方式来进行讲解,希望能帮助读者从高等量子力学的学习中领悟出可以借鉴的思路用于他们各自的研究工作.

实际上,其他领域里的研究工作中也有不少成果及结论可以为高等量子力学课程增添新的内容.另一方面,前沿研究的发展也要求在高等量子力学教程中增加一些全新的内容.作者努力在本书中体现这样的精神.

在本书的准备过程中,西南科技大学的任学藻教授提供了许多有力的帮助;作者和西南科技大学理学院的老师们作过不少交流和讨论,从中得到许多有益的建议,在此向他们表示衷心的感谢.本书成稿后,承中国科学院物理研究所的曹则贤研究员作了全面系统的校订;中国科技大学出版社的肖向兵编辑和科学出版社的钱俊编辑在本书的编辑过程中付出了很多劳动,在此一并致谢.

汪克林

2011年于合肥

目　　录

第 1 章　二次量子化

1.1　量子力学简短回顾

1.1.1　态叠加原理

一个宏观粒子在某一时刻的运动状态由它的位置和动量所确定.它的瞬时运动状态对应于相空间(动量及位置组成的多维空间)中的一个确定的点.不同的运动状态对应于相空间中不同的点,相互间没有任何关联.但微观粒子的运动状态却不同,其每一个确定的状态可以分解成若干别的运动状态;或者反过来说,任何若干个运动状态的某种线性叠加一定还是微观粒子的一个确定的状态——这就是微观粒子运动状态之叠加原理的含义.

如果我们用 Dirac 引进的右矢$|A\rangle$来表示微观粒子的某一确定的运动状态,其中的 A 用以标志不同的参数,那么态叠加原理可以表示为

$$|A\rangle = \sum_i C_i |i\rangle \tag{1.1.1}$$

其中$|i\rangle$表示某些与$|A\rangle$不同的运动状态.与经典情形不同,微观状态和几何空间中的矢量相似.在几何空间中每一矢量总可以看做若干个线性无关的矢量的合成.因此,在量子力学中我们也把运动状态称作态矢.

描述状态的态矢除了用右矢表示外,一般的量子力学书中常用看起来更为具体的波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 来描写状态.波函数的复共轭记作 $\psi^*(\boldsymbol{r})$,它在 Dirac 的表述形式中记为左矢$\langle|$.用波函数表示的两状态间的内积是$\int\psi_A^*(\boldsymbol{r})\psi_B(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}$,而用 Dirac 符号表示则为$\langle A|B\rangle$.一般地,内积是一个复数.

1.1.2　物理观测量和算符

和经典力学相比,量子力学另一个显著的不同点是:在经典力学中当粒子的状态确定后,所有的可观测的物理量就相应地确定了,而在量子力学中单独由态矢是无法确定系统的可观测物理量的.它的理论体系中还需要另一要素,即代表某一物理量的相应算符 $\hat{\alpha}$,该物理量的期待值由系统的状态$|A\rangle(\psi_A(\boldsymbol{r}))$及算符 $\hat{\alpha}$ 按下式给出

$$\alpha = \langle A|\hat{\alpha}|A\rangle \text{ 或 } \alpha = \int\psi^*(\boldsymbol{r})\hat{\alpha}\,\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{1.1.2}$$

物理量的算符应具有以下的性质:第一,系统的态矢在它的作用下一定转变成态矢空间(Hilbert 空间)中的另一态矢;第二,由于态叠加原理,它一定是线性算符.即

$$\hat{\alpha}\{|A\rangle+|B\rangle\}=\hat{\alpha}|A\rangle+\hat{\alpha}|B\rangle$$
$$\hat{\alpha}\{c|A\rangle\}=c\hat{\alpha}|A\rangle \tag{1.1.3}$$

在谈论第三个特点之前,需先引入算符 $\hat{\alpha}$ 的共轭算符 $\hat{\alpha}^+$,其定义是对任意的两态矢 $|A\rangle$, $|B\rangle$,任一算符 $\hat{\alpha}$ 的共轭算符 $\hat{\alpha}^+$ 与 $\hat{\alpha}$ 之间有以下的关系

$$\langle B|\hat{\alpha}^+|A\rangle=(\langle A|\hat{\alpha}|B\rangle)^* \tag{1.1.4}$$

其中星号表示取复共轭.有了共轭算符的定义后,我们就可以讨论物理量算符 $\hat{\alpha}$ 的另一重要性质,即它必须是厄米的

$$\hat{\alpha}^+=\hat{\alpha} \tag{1.1.5}$$

因为只有这样才会有

$$\langle A|\hat{\alpha}|A\rangle=\langle A|\hat{\alpha}|A\rangle^* \tag{1.1.6}$$

即算符的本征值,或者相应的物理观测量,是实数.

1.1.3 测量原理及物理量之间的相容性

由于物理量的算符是厄米算符,易证它的本征态矢对应的本征值为实数,即如果

$$\hat{\alpha}|\eta_i\rangle=\eta_i|\eta_i\rangle \tag{1.1.7}$$

则它的本征值 η_i 一定是实的,且对应于不同本征值的本征态矢之间一定是正交的

$$\langle\eta_i|\eta_j\rangle=0\quad(\eta_i\neq\eta_j) \tag{1.1.8}$$

量子力学的测量原理告诉我们:(a)如果系统处于物理量对应的算符 $\hat{\alpha}$ 的某一本征态矢 $|\eta_i\rangle$ 中,则对该物理量的测量一定给出确定值 η_i;(b)如果系统处于一个一般的态矢 $|A\rangle$ 中,则根据态叠加原理及厄米算符本征态矢集的完备性,可知 $|A\rangle$ 总可以由本征态矢集合 $\{|\eta_i\rangle\}$ 展开

$$|A\rangle=\sum_i c_i|\eta_i\rangle \tag{1.1.9}$$

这时对 $|A\rangle$ 态作对物理量 $\hat{\alpha}$ 的测量,每一次测量将给出某一个本征值 η_i,但每次的测量都无法预期出现的是哪一个 η_i 值.在多次测量后,统计出现 η_i 的几率将正比于 $|c_i|^2$.于是对 $|A\rangle$ 而言,物理量 $\hat{\alpha}$ 的期待值就是多次测量后的平均值

$$\bar{\alpha}=\sum_i|c_i|^2\eta_i/\sum_i|c_i|^2 \tag{1.1.10}$$

(1.1.9)式表示的任意状态可用某一物理算符 $\hat{\alpha}$ 的本征态矢量展开的这一性质同样也适用于将 $|A\rangle$ 用另一物理量算符的本征态矢集展开.将一个状态用不同物理量算符的本征态矢集展开,叫做取不同的表象.这和几何中选择不同的线性无关的基矢来描写矢量的情形可相类比.

测量原理的另一个推论是讨论两个确定的物理量 $\hat{\alpha},\hat{\beta}$ 是否具有共同本征态的问题. 如果有，其含义就是说存在一组本征态矢 $\{|i\rangle\}$，它有如下的性质

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}\mid i\rangle &= \lambda_i\mid i\rangle \\ \hat{\beta}\mid i\rangle &= \gamma_i\mid i\rangle\end{aligned}\tag{1.1.11}$$

如果没有，则分别存在两组不同的 $\{|\eta_i\rangle\}$ 及 $\{|\chi_i\rangle\}$，使

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}\mid \eta_i\rangle &= \eta_i\mid \eta_i\rangle \\ \hat{\beta}\mid \chi_i\rangle &= \chi_i\mid \chi_i\rangle\end{aligned}\tag{1.1.12}$$

如为前者则称物理量算符 $\hat{\alpha}$ 及 $\hat{\beta}$ 相容，如为后者则称此两个算符不相容. 更仔细一点说，如 $\hat{\alpha},\hat{\beta}$ 相容，则它们有共同的本征态矢集. 对这些态进行物理量 $\hat{\alpha}$ 和 $\hat{\beta}$ 的测量会同时给出确定值. 如两者不相容，存在两组不同的本征态矢集，则对一个物理量能给出确定值的状态，对另一物理量就不能，而只能得出各种本征值按一定几率的分布.

物理量算符间的相容性本征地体现在相应算符的对易关系上：即如两算符对易则它们是相容的. 不相容的两物理量算符之间的对易子决定了在任意物理态矢中对两物理量进行测量时的不确定性关系. 这就是所谓的海森堡测不准关系.

1.1.4　动力学

经典力学中决定系统随时间演化的方程是牛顿方程，而在量子力学中决定系统态矢随时间演化的方程是薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\mid t\rangle = \hat{H}\mid t\rangle\tag{1.1.13}$$

其中 $\hat{H}$ 是系统的哈密顿算符. 如 $\hat{H}$ 不显含 t，则它就是保守体系的能量算符；如 $\hat{H}$ 显含 t，则物理系统是非保守体系，算符 $\hat{H}$ 便不是守恒的能量算符.

描述系统随时间的演化规律除了用算符不随 t 改变而系统的态矢随 t 变化的薛定谔图像之外，也可用态矢不随 t 改变而算符随 t 变化的海森堡图像.

对于(1.1.13)式的薛定谔方程，除了有限的若干个特殊系统能求出严格的解析解外，一般系统的求解是困难的. 因此在量子力学的理论发展中，近似求解的方法也是它的一个主要内容，如微扰论、变分法及 W. K. B 方法等. 随着计算机技术的进展，纯数值的解法也得到了普遍的应用.

在量子理论中描述微观粒子的动力学行为和经典力学中对宏观物体的动力学行为的描述存在一个根本性的区别. 对于宏观的物体，由于在演化过程的任一时刻它都有确定的位置及确定的动量，而后者决定了它在下一时刻的运动速率和方向，因此宏观物体的动力学行为是沿着一根确定的轨道在运动. 然而在量子理论中，微观粒子的位置及动量恰巧是一对不相容的、共轭的物理量，在演化过程中的每一时

刻它的位置及动量都不能同时确定. 所以微观粒子的动力学行为是谈不上具有轨道的概念的.

宏观物体的运动具有确切的轨道,而微观粒子的演化不具有确定轨道,这样的一个宏观力学规律及微观量子理论间截然不同的特点启发我们必须讨论一下这样的情形和所谓的对应原理是否矛盾. 对应原理认为宏观力学规律应当被看做是在一定条件下量子理论的近似. 如果考虑到宏观物体的运动是沿确定轨道进行,而微观粒子的演化毫无轨道可言,也许会问这截然不同的两种情况如何能在一定条件下发生从量子到经典的过渡,这个问题在后面讨论路径积分时会得到详细的解答,这里先粗略地谈一下. 在路径积分中微观粒子从初始状态演化到末态毫无轨道可言,不过这也可换成另一个说法,即可以看做是经过无数多个不同的路径从初态发展到末态,而这无穷多个不同的路径的出现具有不同的几率. 当粒子的质量越来越大时,不同路径具有的几率差异越大;当粒子接近于宏观物体的尺寸时在无穷多个路径中只有围绕经典轨道邻域的那些路径才有显著的几率,而远离经典轨道的路径的几率都趋于零. 这样,关于宏观物体体系的量子理论就会过渡到具有确定轨道的经典理论.

1.2 多粒子体系

1.2.1 多粒子体系的态矢

在第一节中我们简短回顾了量子力学中有关的单粒子系统的内容. 量子理论中也讨论全同的多粒子体系. 在单粒子体系中为了描述态矢,需先确定一个表象,即选择某一个物理量算符的本征态矢集 $\{|\alpha\rangle\}$ 作为基态矢,然后将任一态矢用这一组基态矢来展开. 因此对于 N 个全同粒子体系一开始自然会选择如下的归一正交基矢集来作多粒子体系的基态矢集.

$$|\alpha_1,\cdots,\alpha_N\rangle \equiv |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\alpha_N\rangle \tag{1.2.1}$$

这种归一正交基态矢对应的波函数就是这种基态矢在位置表象中的展开表示

$$\begin{aligned}\psi_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N}(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N) &= \langle \boldsymbol{r}_1\cdots\boldsymbol{r}_N \mid \alpha_1\cdots\alpha_N\rangle \\ &= (\langle \boldsymbol{r}_1 | \otimes \langle \boldsymbol{r}_2 | \otimes \cdots \otimes \langle \boldsymbol{r}_N |)(|\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\alpha_N\rangle) \\ &= \varphi_{\alpha_1}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{\alpha_2}(\boldsymbol{r}_2)\cdots\varphi_{\alpha_N}(\boldsymbol{r}_N)\end{aligned} \tag{1.2.2}$$

这种基的内积可表述为

$$(\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N \mid \alpha'_1\alpha'_2\cdots\alpha'_N) = \langle\alpha_1 \mid \alpha'_1\rangle\langle\alpha_2 \mid \alpha'_2\rangle\cdots\langle\alpha_N \mid \alpha'_N\rangle \tag{1.2.3}$$

不过这样做还没有考虑到全同粒子系应当遵守的全同性原理. 为了满足该原理,对于整数自旋的玻色子体系,要求波函数是全对称的,对于非整数自旋的费米子体系,要求波函数是全反称的. 为此,需要对(1.2.1)式中引入的基矢集作适当的改

造，如将 P 标记为如下的置换

$$(1,2,\cdots,N)\xrightarrow{P}(P_1,P_2,\cdots,P_N)$$

则满足全同性原理的波函数应有如下的性质

$$\psi(\boldsymbol{r}_{P_1},\boldsymbol{r}_{P_2},\cdots,\boldsymbol{r}_{P_N})=\zeta^P\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\cdots,\boldsymbol{r}_N) \tag{1.2.4}$$

其中的因子 ζ^P，对玻色子体系来讲

$$\zeta^P=1 \tag{1.2.5}$$

对费米子体系

$$\zeta^P=\begin{cases}+1 & \text{偶置换}\\ -1 & \text{奇置换}\end{cases} \tag{1.2.6}$$

显然前面引入的 N 粒子体系的波函数，即由单粒子系的 Hilbert 空间直乘生成的 N 粒子体系的 H_N 空间的态矢并不满足全同性原理的要求，为了使物理的态矢成为全对称子空间（玻色子体系）或全反称子空间（费米子体系）中的态矢. 应将(1.2.2)式引入的多粒子体系波函数投影到这两个子空间中去表示为

$$P_{\left\{\begin{smallmatrix}B\\F\end{smallmatrix}\right\}}\psi_{\alpha_1\cdots\alpha_N}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)=\frac{1}{N!}\sum_P\zeta^P\psi_{\alpha_1\cdots\alpha_N}(\boldsymbol{r}_{P_1},\boldsymbol{r}_{P_2},\cdots,\boldsymbol{r}_{P_N}) \tag{1.2.7}$$

可以证明上式中引入的 P_B 及 P_F 确实是投影算符，因为它们满足以下关系

$$P^2_{\left\{\begin{smallmatrix}B\\F\end{smallmatrix}\right\}}=P_{\left\{\begin{smallmatrix}B\\F\end{smallmatrix}\right\}}$$

对于上面的等式只需对 P_F 的情形证明即可，因为对 P_B 类似可得.

证明如下：

$$P_F^2\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)=\frac{1}{N!}\frac{1}{N!}\sum_P\sum_{P'}\zeta^{P'}\zeta^P\psi(\boldsymbol{r}_{P'_1P_1},\boldsymbol{r}_{P'_2P_2},\cdots,\boldsymbol{r}_{P'_NP_N}) \tag{1.2.8}$$

由于两次置换仍是一次置换，故可将 $P'P$ 改写为另一置换 Q. 另一方面知

P 为偶置换，P' 为偶置换 $\longrightarrow Q$ 为偶置换

P 为偶置换，P' 为奇置换 $\longrightarrow Q$ 为奇置换

P 为奇置换，P' 为偶置换 $\longrightarrow Q$ 为奇置换

P 为奇置换，P' 为奇置换 $\longrightarrow Q$ 为偶置换

故有

$$\zeta^P\zeta^{P'}=\zeta^Q$$

因此(1.2.7)式可改写成

$$\begin{aligned}P^2\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)&=\frac{1}{N!}\sum_P\left(\frac{1}{N!}\sum_Q\zeta^Q\psi(\boldsymbol{r}_{Q_1},\boldsymbol{r}_{Q_2},\cdots,\boldsymbol{r}_{Q_N})\right)\\&=\frac{1}{N!}\sum_P P_F\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)\\&=P_F\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)\frac{1}{N!}\sum_P\\&=P_F\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)\end{aligned} \tag{1.2.9}$$

至此投影算符的性质就得以证明.

1.2.2 多粒子体系态矢的归一化

现在把 N 粒子体系中的位置波函数的对称化及反对称化的办法推广到任意表象中去,使得 N 粒子体系在任何表象中的态矢都满足全同性原理的要求

$$
\begin{aligned}
|\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle &= \frac{1}{N!}\sum_P \zeta^P\ |\alpha_{P_1}\rangle\otimes|\alpha_{P_2}\rangle\otimes\cdots\otimes|\alpha_{P_N}\rangle \\
&= P_F^B(|\alpha_1\rangle\otimes\cdots\otimes|\alpha_N\rangle)
\end{aligned}
\tag{1.2.10}
$$

尽管(1.2.8)式已成为符合全同性原理的多粒子体系的态矢,但它并不是归一的

$$
\begin{aligned}
\langle\alpha_1\cdots\alpha_N\mid\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle &= \frac{1}{(N!)^2}\sum_{PP'}\zeta^P\zeta^{P'}\langle\alpha_{P_N}\mid\otimes\cdots\otimes\langle\alpha_{P_1}\mid(|\alpha_{P'_1}\rangle\cdots|\alpha_{P'_N}\rangle) \\
&= \frac{1}{(N!)^2}\sum_P\Big(\prod_i n_{\alpha_i}!\Big) \\
&= \prod_i(n_{\alpha_i}!)\frac{1}{(N!)^2}\sum_P \\
&= \frac{1}{N!}\prod_\alpha(n_{\alpha_i}!)
\end{aligned}
\tag{1.2.11}
$$

在上式的推导中,第二等式后面出现因子 $\Big(\prod_\alpha(n_\alpha!)\Big)$ 的理由如下:对于玻色子体系而言,在某一单粒子态矢中允许有多于一个粒子的存在.因此,一般来讲在 $\alpha_1,\cdots\alpha_N$ 的这 N 个单粒子态矢中并不都是不同的,而是只有 m 个不同的 α_i($m\leqslant N$),其中 α_i 单粒子态上如有 n_{α_i} 个,则在作内积时会出现 $n_{\alpha_i}!$ 种内积的贡献.对于费米多粒子体系,由于有泡利不相容限制,n_α 只能取为 1.根据(1.2.11)式的结果,我们将重新定义既满足全同性原理又是归一的多粒子体系的态矢为

$$
|\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle = \sqrt{\frac{N!}{\prod_i n_{\alpha_i}!}}P_F^B(|\alpha_1\rangle\otimes\cdots\otimes|\alpha_N\rangle)
\tag{1.2.12}
$$

这样做了以后和单粒子态矢的情况一样,由于(1.2.12)式中的态矢是正交归一的,故其也有如下的封闭性

$$
\sum_{\alpha_1\cdots\alpha_N}|\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle\langle\alpha_1\cdots\alpha_N| = 1
$$

1.3 产生和湮灭算符

多粒子体系中的一个重要问题就是粒子间的相互作用.相互作用中的两粒子,不论其相互作用的机制如何,在能量、动量产生跃迁以后,两粒子总是从初始时的量子数为 α 及 β 的状态转变成量子数为 γ 及 δ 的状态.这样一个作用的过程可以

自然地表述为α状态和β状态粒子的消失继之以γ状态及δ状态粒子的产生. 以后会看到用这种描述也会带来计算上的便捷. 为此,需要引入描述这一转变过程的产生及湮灭算符.

首先引入产生算符a_λ^+,其定义是在它的作用下N个对称化的玻色子系的状态或N个反称化的费米子系的状态增加一个单子态$|\lambda\rangle$并成为$N+1$个对称化的玻色子系或$N+1$个反称化的费米子系的状态. 如都用正交归一基来表示原有的N粒子系的态$|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle$及后来的$|\lambda\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle$,则有

$$a_\lambda^+ \mid \lambda_1\cdots\lambda_N\rangle = \sqrt{n_\lambda+1} \mid \lambda\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle \tag{1.3.1a}$$

其中上式右方出现的n_λ是原来$\lambda_1\cdots\lambda_N$中包含的λ单粒子态的占有数. 右方之所以出现$\sqrt{n_\lambda+1}$的因子是因为将(1.3.1a)式左方的态对称化为$N+1$玻色子的态或反称化为$N+1$费米子系的态,则有

$$a_\lambda^+ \mid \lambda_1\cdots\lambda_N\rangle = \frac{\sqrt{(N+1)!}}{\sqrt{\prod\limits_{\alpha\neq\lambda}(n_\alpha!)\cdot n_\lambda!}}\sum_P \zeta^P \mid \lambda_{P_0}\rangle \otimes \mid \lambda_{P_1}\rangle \otimes\cdots\otimes \mid \lambda_{P_N}\rangle$$

而正交归一的对称化$N+1$玻色子系或反称化的$N+1$费米子系的$|\lambda\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle$为

$$\mid \lambda\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle = \frac{\sqrt{(N+1)!}}{\sqrt{\prod\limits_{\alpha\neq\lambda}(n_\alpha!)\cdot(n_\lambda+1)!}}\sum_P \zeta^P \mid \lambda_{P_0}\rangle \otimes \mid \lambda_{P_1}\rangle \otimes\cdots\otimes \mid \lambda_{P_N}\rangle$$

对于费米子体系,一个单子态最多只能由一个粒子占有. 所以,如n_λ已为1,则不可能再加入一个λ的粒子. 只有$n_\lambda=0$的情形才允许加入一个λ的粒子,故对于费米子体系,(1.3.1a)式可改写成

$$a_\lambda^+ \mid \lambda_1\cdots\lambda_N\rangle = \mid \lambda\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle \tag{1.3.1b}$$

还可得出如下的一些推论.

(a) 记真空态为$|0\rangle$,应有

$$a_\lambda^+ \mid 0\rangle = \mid \lambda\rangle \tag{1.3.2}$$

(b) 将 Fock 空间扩大到包含不同粒子数子空间的更广泛的空间时,即

$$\text{玻色体系}\quad B = B_0 \oplus B_1 \oplus B_2 \oplus \cdots = \oplus_{n=0}^{\infty} B_n \tag{1.3.3a}$$

$$\text{费米体系}\quad F = F_0 \oplus F_1 \oplus F_2 \oplus \cdots = \oplus_{n=0}^{\infty} F_n \tag{1.3.3b}$$

封闭关系也推广成

$$1 = \mid 0\rangle\langle 0 \mid + \sum_{n=1}^{\infty} \mid \lambda_1\cdots\lambda_n\rangle\langle\lambda_1\cdots\lambda_n \mid \tag{1.3.4}$$

(c) 产生算符间的对易关系. 根据玻色子及费米子的对称性及反称性,应有

$$\begin{aligned} a_\lambda^+ a_u^+ \mid \lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_N\rangle &= \sqrt{(n_\lambda+1)(n_u+1)} \mid \lambda u\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle \\ &= \sqrt{(n_\lambda+1)(n_u+1)}\,\zeta \mid u\lambda\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle \\ &= \zeta a_u^+ a_\lambda^+ \mid \lambda_1\cdots\lambda_N\rangle \end{aligned} \tag{1.3.5}$$

由于$|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle$是任意的态矢，故有

$$a_\lambda^+ a_u^+ - \zeta a_u^+ a_\lambda^+ = 0 \tag{1.3.6a}$$

因此，对玻色子而言有如下的对易关系

$$[a_\lambda^+, a_u^+]_- \equiv [a_\lambda^+, a_u^+] = a_\lambda^+ a_u^+ - a_u^+ a_\lambda^+ = 0 \tag{1.3.6b}$$

对费米子而言有如下的反对易关系

$$[a_\lambda^+, a_u^+]_+ \equiv a_\lambda^+ a_u^+ + a_u^+ a_\lambda^+ = 0 \tag{1.3.6c}$$

(d) 由于 a_λ^+ 的共轭算符为 a_λ. 将(1.3.6a)式取共轭得

$$a_u a_\lambda - \zeta a_\lambda a_u = 0 \tag{1.3.7}$$

对玻色子而言，得$[a_\lambda, a_u]=0$，而对费米子而言得$[a_\lambda, a_u]_+=0$

(e) 对(1.3.1a)式取共轭得

$$\sqrt{n_\lambda+1}\langle\lambda,\lambda_1\cdots\lambda_N| = \langle\lambda_1\cdots\lambda_N|a_\lambda$$

将上式右乘以$|\alpha_1\cdots\alpha_m\rangle$得

$$\sqrt{n_\lambda+1}\langle\lambda,\lambda_1\cdots\lambda_N|\alpha_1\cdots\alpha_m\rangle = \langle\lambda_1\cdots\lambda_N|a_\lambda|\alpha_1\cdots\alpha_m\rangle \tag{1.3.8}$$

从上式左方立即看出，要使其不为零必须有 $m=N+1$. 而右方要不为零只有 $a_\lambda|\alpha_1\cdots\alpha_m\rangle$是 N 个粒子的态. 可见 a_λ 的物理意义是它作用于右矢时会湮灭掉一个粒子. 不仅如此，当将$|\alpha_1\cdots\alpha_m\rangle$就取作$|\lambda,\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle$时左方成为$\sqrt{n_\lambda+1}$，右方成为$\langle\lambda_1\cdots\lambda_N|a_\lambda|\lambda\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle$，即$\langle\lambda_1\cdots\lambda_N|a_\lambda|\lambda\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle=\sqrt{n_\lambda+1}$.

可见

$$a_\lambda|\lambda\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle = \sqrt{n_\lambda+1}|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle \tag{1.3.9a}$$

再考虑到$|\lambda\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle$中居于单粒子态 λ 上的占有数是 $n_\lambda+1$，而$|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle$中居于单粒子态 λ 上的占有数是 n_λ，可将(1.3.9a)式改写成

$$a_\lambda|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle = \sqrt{n_\lambda}|\lambda_1\cdots\lambda_{N-1}\rangle \tag{1.3.9b}$$

(f) 现在讨论产生算符与湮灭算符间的对易关系. 先讨论玻色子体系的情形，选任意的$|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle$，其中有 n_λ 个粒子居于单粒子态$|\lambda\rangle$，n_μ 个粒子居于单粒子态$|\mu\rangle(\lambda\neq\mu)$，于是有

$$\begin{aligned}&(a_\lambda a_\lambda^+ - a_\lambda^+ a_\lambda)|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle\\&= a_\lambda\sqrt{n_\lambda+1}|\lambda\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle - a_\lambda^+\sqrt{n_\lambda}|\lambda_1\cdots\lambda_{N-1}\rangle\\&= \sqrt{n_\lambda+1}\sqrt{n_\lambda+1}|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle - \sqrt{n_\lambda}\sqrt{n_\lambda}|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle\\&= |\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle\end{aligned} \tag{1.3.10a}$$

$$\begin{aligned}&(a_\lambda a_\mu^+ - a_\mu^+ a_\lambda)|\lambda_1,\cdots,\lambda_N\rangle\\&= a_\lambda\sqrt{n_\mu+1}|\mu\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle - a_\mu^+\sqrt{n_\lambda}|\lambda_1\cdots\lambda_{N-1}\rangle\\&= \sqrt{n_\mu+1}\sqrt{n_\lambda}|\mu\lambda_1\cdots\lambda_{N-1}\rangle - \sqrt{n_\mu+1}\sqrt{n_\lambda}|\mu\lambda_1\cdots\lambda_{N-1}\rangle\\&= 0\end{aligned} \tag{1.3.10b}$$

由于$|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle$的任意性，综合(1.3.10a)及(1.3.10b)得

$$[a_\lambda, a_\mu^+] = \delta_{\lambda\mu} \tag{1.3.10c}$$

对费米子而言，产生算符与湮灭算符间的反对易关系为

$$[a_\lambda, a_\mu^+]_+ = \delta_{\lambda\mu} \tag{1.3.10d}$$

证明如下：

先看$(a_\lambda a_\lambda^+ + a_\lambda^+ a_\lambda)|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle = \begin{cases} a_\lambda|\lambda\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle = |\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle \text{如} |\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle \text{不含} |\lambda\rangle \\ a_\lambda^+|\lambda_1\cdots\lambda_{N-1}\rangle = |\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle \text{如} |\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle \text{含} |\lambda\rangle \end{cases}$

可见$(a_\lambda a_\lambda^+ + a_\lambda^+ a_\lambda) = 1$.

再看$(a_\lambda a_\mu^+ + a_\mu^+ a_\lambda)|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle \lambda \neq \mu$. 分三种情况.

(i) $|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle$不含$\lambda$.

则

$$(a_\lambda a_\mu^+ + a_\mu^+ a_\lambda)|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle = a_\lambda a_\mu^+|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle = a_\lambda|\mu\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle = 0$$

(ii) $|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle$含$\lambda$不含$\mu$.

则

$$\begin{aligned}(a_\lambda a_\mu^+ + a_\mu^+ a_\lambda)|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle &= a_\lambda|\mu\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle + a_\mu^+|\lambda_1\cdots\lambda_{N-1}\rangle \\ &= (-1)^N|\lambda_1\cdots\lambda_{N-1}\mu\rangle + |\mu\lambda_1\cdots\lambda_{N-1}\rangle \\ &= (-1)^N(-1)^{N-1}|\mu\lambda_1\cdots\lambda_{N-1}\rangle + |\mu\lambda_1\cdots\lambda_{N-1}\rangle \\ &= 0\end{aligned}$$

(iii) $|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle$含$\lambda$，含$\mu$.

则

$$(a_\lambda a_\mu^+ + a_\mu^+ a_\lambda)|\lambda_1\cdots\lambda_N\rangle = a_\mu^+ + |\lambda_1\cdots\lambda_{N-1}\rangle = 0$$

因为$|\lambda_1\cdots\lambda_{N-1}\rangle$中少一个单粒子态$\lambda$但仍含$\mu$单粒子态.

至此(1.3.10d)式得以证明.

(g) 定义粒子数算符

$$\hat{n}_\alpha = a_\alpha^+ a_\alpha \tag{1.3.11}$$

由(1.3.9)式知

$$\begin{aligned}\hat{n}_\alpha|\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle &= a_\alpha^+ a_\alpha|\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle \\ &= a_\alpha^+\sqrt{n_\alpha}|\alpha_1\cdots\alpha_{N-1}\rangle \\ &= \sqrt{n_\alpha}\sqrt{(n_\alpha-1)+1}|\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle \\ &= n_\alpha|\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle\end{aligned} \tag{1.3.12}$$

注意第二行的$|\alpha_1\cdots\alpha_{N-1}\rangle$中由于湮灭掉一个$|\alpha\rangle$的粒子，所以在其中居于$|\alpha\rangle$的粒子数比$|\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle$中少一个. 由于$n_\alpha$是$|\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle$中含$|\alpha\rangle$单粒子态的占有数，故粒子数算符的物理意义从(3.1.12)式可以清楚地看出.

1.4 多体算符

讨论了多粒子体系的态矢及基本的产生、湮灭算符后，在这些知识基础上自然应转入讨论作用在多粒子态矢上的多体算符. 不过常见和重要的是两类多体算符，其中第一类算符作用到多粒子态矢时将分别作用在每一个单粒子态上，所以称作单体算符，而第二类算符将作用到其中的每一对单粒子态上因而称作双体算符. 下面将分别予以讨论.

在讨论单体、双体算符之前，先要讨论多体算符的一个普遍性质，即物理的多体算符在它作用于满足全同性原理的多粒子系态矢之后形成的新态矢也应满足全同性原理. 换句话说，对任意的多粒子态矢$|\rangle$和任一多体算符$\hat{U}$应有

$$P_{\left\{\begin{smallmatrix}B\\F\end{smallmatrix}\right\}}\hat{U}\,|\rangle=\hat{U}P_{\left\{\begin{smallmatrix}B\\F\end{smallmatrix}\right\}}\,|\rangle$$

由于$|\rangle$是任意的，故有

$$\hat{U}P_{\left\{\begin{smallmatrix}B\\F\end{smallmatrix}\right\}}=P_{\left\{\begin{smallmatrix}B\\F\end{smallmatrix}\right\}}\hat{U} \tag{1.4.1}$$

即多粒子算符应和对称化(反称化)算符对易.

1.4.1 单体算符

由于单体算符$\hat{U}$将分别作用于多粒子态矢中的每一个单粒子态，所以自然选择$\hat{U}$的归一本征态矢集$\{|\alpha\rangle\}$作为单粒子态的基，即有

$$\hat{U}\mid\alpha\rangle=U_\alpha\mid\alpha\rangle,\quad U_\alpha=\langle\alpha\mid\hat{U}\mid\alpha\rangle \tag{1.4.2}$$

有了以上的准备就可以计算单体算符$\hat{U}$在多粒子态矢中如何作用.

$$\begin{aligned}\hat{U}\mid\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle&=\hat{U}MP_F^B(\mid\alpha_1\rangle\otimes\cdots\otimes\mid\alpha_N\rangle)\\&=MP_F^B\hat{U}(\mid\alpha_1\rangle\otimes\cdots\otimes\mid\alpha_N\rangle)\\&=MP_F^B\sum_i U_{\alpha_i}(\mid\alpha_1\rangle\otimes\cdots\otimes\mid\alpha_N\rangle)\\&=\sum_i U_{\alpha_i}MP_F^B(\mid\alpha_1\rangle\otimes\cdots\otimes\mid\alpha_N\rangle)\\&=\sum_i U_{\alpha_i}\mid\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle\end{aligned}$$

上式中的M是态矢的归一化常数. 因此可以得出结论：在单粒子基态矢是$\hat{U}$的本征态矢的情况下，$\hat{U}$对多粒子态矢的作用可表示成

$$\hat{U}=\sum_i U_{\alpha_i}=\sum_\alpha U_\alpha \hat{n}_\alpha=\sum_\alpha \langle\alpha\mid\hat{U}\mid\alpha\rangle a_\alpha^+ a_\alpha \tag{1.4.3}$$

根据上式可将两个重要的单体算符（即势能算符及动能算符）的显式表达求出.

(a) 势能算符 $\hat{U}(\boldsymbol{r})$的对角表象是位置表象，但应用(1.4.3)式时要注意这时应把原来分立的写法换成连续积分的形式. 因此应有以下的改变

$$\sum_\alpha \to \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

$$\langle\alpha\mid\hat{U}\mid\alpha\rangle \to \langle\boldsymbol{r}\mid\hat{U}(\boldsymbol{r})\mid\boldsymbol{r}\rangle=U(\boldsymbol{r})$$

同时按常用的记号把相应的产生算符 a_r^+ 改写成 $\hat{\psi}^+(\boldsymbol{r})$，$a_r$写成 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$，因此按(1.4.3)式可将势能算符写成

$$\hat{U}(\boldsymbol{r})=\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}U(\boldsymbol{r})\hat{\psi}^+(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) \tag{1.4.4}$$

(b) 动能算符 $\hat{T}$

$$\hat{T}=\frac{\hat{p}^2}{2m}$$

和势能算符的做法相似，这时要选动能（即动量）的本征态矢集$\{|\boldsymbol{p}\rangle\}$作基态矢. 类似于势能情形把求和改变为积分的做法，可以立即写出

$$\begin{aligned}
\hat{T}&=\int \mathrm{d}\boldsymbol{p}\,\frac{p^2}{2m}\hat{\psi}^+(\boldsymbol{p})\hat{\psi}(\boldsymbol{p})\\
&=\int \mathrm{d}\boldsymbol{p}\,\frac{p^2}{2m}\iint\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}(\hat{\psi}^+(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar})(\hat{\psi}(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}'/\hbar})\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\\
&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \mathrm{d}\boldsymbol{p}\iint\hat{\psi}^+(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\hat{\psi}(\boldsymbol{r}')\,\frac{\hbar^2}{2m}(-\nabla'^2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}'/\hbar}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\\
&=-\frac{\hbar^2}{2m}\iiint\hat{\psi}^+(\boldsymbol{r})\,\nabla'^2\hat{\psi}(\boldsymbol{r}')\,\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')/\hbar}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\mathrm{d}\boldsymbol{p}\\
&=-\frac{\hbar^2}{2m}\iint\hat{\psi}^+(\boldsymbol{r})\,\nabla'^2\hat{\psi}(\boldsymbol{r}')\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\\
&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\hat{\psi}^+(\boldsymbol{r})\,\nabla^2\hat{\psi}(\boldsymbol{r})
\end{aligned} \tag{1.4.5}$$

1.4.2　双体算符

双体算符作用于多粒子态矢的每一对单粒子态上，即

$$\hat{V}\mid\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle=\sum_{1\leqslant i\leqslant j\leqslant N}\hat{V}_{ij}\mid\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle \tag{1.4.6}$$

其中的算符 $\hat{V}_{ij}$作用在$|\alpha_i\rangle\otimes|\alpha_j\rangle$上. 类似于单体算符的推导，如果选择$\{|\alpha\rangle\}$使

$$\hat{V}_{ij}\mid\alpha_i\rangle\otimes\mid\alpha_j\rangle=V_{\alpha_i\alpha_j}\mid\alpha_i\rangle\otimes\mid\alpha_j\rangle \tag{1.4.7}$$

这相当于$|\alpha_i\rangle\otimes|\alpha_j\rangle$是$\hat{V}$算符的本征态矢对，于是$\hat{V}$作用到多粒子态矢上时便得

$$\hat{V}\mid\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle=\left(\frac{1}{2}\sum_{i,j}^{N}V_{\alpha_i\alpha_j}\right)\mid\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle \tag{1.4.8}$$

其中因子$\frac{1}{2}$来自对i,j的求和，应乘以$\frac{1}{2}$以消除重复计算的效果. 现在来看$|\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle$中具有同样的$(\alpha,\beta)$的对数是多少. 前面已谈过$|\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle$中相同的单粒子态$\alpha$的个数是占有数$n_\alpha$，因此$\sum\limits_{i,j}^{N}V_{\alpha_i\alpha_j}$中

$$\begin{cases}\text{如}\mid\alpha_i\rangle=\mid\alpha\rangle\neq\mid\alpha_j\rangle=\mid\beta\rangle & \text{则对数为}\ n_\alpha n_\beta\\ \text{如}\mid\alpha_i\rangle=\mid\alpha\rangle=\mid\alpha_j\rangle & \text{则对数为}\ n_\alpha(n_\alpha-1)\end{cases}$$

故有

$$\sum_{i,j}V_{ij}=\sum_{\alpha\beta}V_{\alpha\beta}(n_\alpha n_\beta-\delta_{\alpha\beta}n_\alpha) \tag{1.4.9}$$

因此可将(1.4.8)式改写为

$$\hat{V}\mid\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}V_{\alpha\beta}(\hat{n}_\alpha\hat{n}_\beta-\delta_{\alpha\beta}\hat{n}_\alpha)\cdot\mid\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle \tag{1.4.10}$$

而

$$\begin{aligned}\hat{n}_\alpha\hat{n}_\beta-\delta_{\alpha\beta}\hat{n}_\alpha&=a_\alpha^+a_\alpha a_\beta^+a_\beta-\delta_{\alpha\beta}a_\alpha^+a_\alpha\\&=a_\alpha^+(a_\alpha a_\beta^+-\delta_{\alpha\beta})a_\beta\\&=a_\alpha^+(\zeta a_\beta^+a_\alpha)a_\beta\\&=a_\alpha^+a_\beta^+a_\beta a_\alpha\end{aligned}$$

最后可将(1.4.8)式表示为

$$\hat{V}\mid\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}V_{\alpha\beta}a_\alpha^+a_\beta^+a_\beta a_\alpha\mid\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle \tag{1.4.11}$$

现在将(1.4.11)式应用于多粒子体系中的两粒子间势能算符，这时在$\langle\boldsymbol{r}\rangle$表象中是对角的. 如前将分立形式改变为连续变量和积分形式

$\alpha\to\boldsymbol{r}_1\quad\beta\to\boldsymbol{r}_2$

$a_\alpha^+\to\hat{\psi}^+(\boldsymbol{r}_1)\quad a_\alpha\to\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1)\quad a_\beta^+\to\hat{\psi}^+(\boldsymbol{r}_2)\quad a_\beta\to\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_2)\quad\sum\limits_{\alpha\beta}\to\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2$

因此两体间的势能的作用形式可表示为

$$\begin{aligned}\hat{V}&=\frac{1}{2}\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\langle\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2\mid\hat{V}\mid\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2\rangle\hat{\psi}^+(\boldsymbol{r}_1)\hat{\psi}^+(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1)\\&=\frac{1}{2}\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 v(r_1,r_2)\hat{\psi}^+(\boldsymbol{r}_1)\hat{\psi}^+(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(r_1)\end{aligned} \tag{1.4.12}$$

其中
$$v(r_1,r_2)\equiv\langle\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2|\hat{V}|\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2\rangle$$

1.5　谐振子和声子

1.5.1　一维谐振子

下面以一维谐振子为例讨论如何用产生、湮灭算符来求解一个物理系统. 首先回顾一下在量子力学课程中讨论过的内容.

一维谐振子的哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2 \tag{1.5.1}$$

其中

$$\hat{p} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{1.5.2}$$

引入

$$\omega^2 = \frac{k}{m} \tag{1.5.3}$$

并作变量变换

$$\eta = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x \equiv \alpha x \tag{1.5.4}$$

则 $\hat{p}$ 应表示为

$$\hat{p} = -\mathrm{i}\,(\hbar m\omega)^{\frac{1}{2}}\frac{\partial}{\partial\eta} \tag{1.5.5}$$

因此 $\hat{H}$ 可改写成

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} + \eta^2\right) \tag{1.5.6}$$

由量子力学的讨论,已知上述的能量本征态为

$$\psi_n(x) = N_n \mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} H_n(\alpha x) \tag{1.5.7}$$

其中 $H_n(\alpha x)$是厄米多项式,相应的能量本征值为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{1.5.8}$$

将对应于 $\psi_n(x)$的态矢记成$|n\rangle$,利用厄米多项式的性质,可将 $\boldsymbol{x}$ 及 $\hat{p}$ 在定态集$\{|n\rangle\}$中的矩阵元表示为

$$\begin{aligned}\langle n' \mid \boldsymbol{x} \mid n\rangle &= \int \mathrm{d}x\psi_{n'}^*(x)x\psi_n(x)\\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\left[(n')^{\frac{1}{2}}\delta_{n',n+1} + (n)^{\frac{1}{2}}\delta_{n',n-1}\right]\end{aligned}$$

$$\langle n' \mid \hat{p} \mid n\rangle = \int \mathrm{d}x\psi_{n'}^*(x)\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_n(x)$$

$$=-\frac{1}{\mathrm{i}}\left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\left[(n')^{\frac{1}{2}}\delta_{n',n+1}-(n)^{\frac{1}{2}}\delta_{n',n-1}\right] \tag{1.5.9}$$

以上是对一般量子力学书中得到的一维谐振子内容的回顾.

1.5.2 用产生、湮灭算符讨论谐振子

现在将这一问题应用二次量子化方法的产生、湮灭算符来重新讨论. 首先引入两个互为共轭的无量纲算符

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\eta+\frac{\partial}{\partial\eta}\right)=\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left(x+\frac{\mathrm{i}\hat{p}}{m\omega}\right) \\ a^{+} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\eta-\frac{\partial}{\partial\eta}\right)=\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left(x-\frac{\mathrm{i}\hat{p}}{m\omega}\right) \end{aligned} \tag{1.5.10}$$

将 a 及 a^{+} 组成的两个算符 aa^{+} 和 $a^{+}a$ 作用到任意的波函数 $\psi(\eta)$ 上，有

$$\begin{aligned} aa^{+}\psi(\eta) &= \frac{1}{2}\left(\eta+\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\left(\eta-\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\psi(\eta) \\ &= \frac{1}{2}(\eta^{2}\psi+\psi-\psi'') \\ a^{+}a\psi(\eta) &= \frac{1}{2}\left(\eta-\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\left(\eta+\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\psi(\eta) \\ &= \frac{1}{2}(\eta^{2}\psi-\psi-\psi'') \end{aligned}$$

两式相减得

$$[aa^{+}-a^{+}a]\psi(\eta)=\psi(\eta) \tag{1.5.11}$$

由于 $\psi(\eta)$ 是任意的波函数，所以由上式可得出

$$[a,a^{+}]\equiv[aa^{+}-a^{+}a]=1 \tag{1.5.12}$$

类似可得

$$\begin{aligned} [a,a] &= 0 \\ [a^{+},a^{+}] &= 0 \end{aligned} \tag{1.5.13}$$

从(1.5.12)及(1.5.13)式看出，引入的 a,a^{+} 满足前面讨论过的产生、湮灭算符的对易关系. 因此接下来要做的自然是和前面一样地引入真空态 $|0\rangle$，它满足

$$a\mid 0\rangle=0 \tag{1.5.14}$$

以及“粒子”态

$$\mid n\rangle=\frac{(a^{+})^{n}}{(n!)^{\frac{1}{2}}}\mid 0\rangle \tag{1.5.15}$$

和前面的普遍讨论相比较可以看出，这里是只有一种单粒子态的简单情形. 由(1.5.15)式可得

$$a^{+}|n\rangle=\frac{1}{(n!)^{\frac{1}{2}}}(a^{+})^{n+1}|0\rangle=\frac{(n+1)^{\frac{1}{2}}}{[(n+1)!]^{\frac{1}{2}}}(a^{+})^{n+1}|0\rangle$$
$$=(n+1)^{\frac{1}{2}}|n+1\rangle \tag{1.5.16}$$

这个关系在前面的普遍讨论中已得到过. 如前所述,它表明 a^{+} 具有产生算符的含义. 由(1.5.16)式得

$$\langle n'|a^{+}|n\rangle=(n+1)^{\frac{1}{2}}\delta_{n',n+1} \tag{1.5.17}$$

取上式的复共轭并交换 n 及 n' 的标号,得

$$\langle n'|a|n\rangle=(n)^{\frac{1}{2}}\delta_{n',n-1}\text{ 或 }a|n\rangle=(n)^{\frac{1}{2}}|n-1\rangle \tag{1.5.18}$$

这也正是 a 作为湮灭算符的含义. 此外还有

$$a^{+}a|n\rangle=a^{+}(n)^{\frac{1}{2}}|n-1\rangle=n|n\rangle \tag{1.5.19}$$

这说明 $a^{+}a$ 是数算符. 以上的讨论用产生、湮灭算符重新完整表述了一遍一维谐振子的主要内容. 于是我们自然要问这里的"粒子"指的是什么? 为此,让我们回到原来的谐振子哈密顿量以及引入 a,a^{+} 的(1.5.10)式,有

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}+\eta^2\right)\\&=\frac{\hbar\omega}{2}\left[\frac{1}{2}\left(\eta+\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\left(\eta-\frac{\partial}{\partial\eta}\right)+\frac{1}{2}\left(\eta-\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\left(\eta+\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right]\\&=\frac{\hbar\omega}{2}(aa^{+}+a^{+}a)\\&=\hbar\omega\left(a^{+}a+\frac{1}{2}\right)\end{aligned} \tag{1.5.20}$$

将上式作用到(1.5.15)式中的"粒子"态上时,可得 $\hat{H}|n\rangle=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle$. 从这一等式看出,一维谐振子体系的能量取决于具有能量为 $\hbar\omega$ 的能量量子的数目,可见它的能量就是这些能量为 $\hbar\omega$ 的量子的能量之和,因此可以说这里的"粒子"就是谐振子系统的能量量子. 此外,由(1.5.10)式及解可得

$$\begin{aligned}\hat{x}&=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}(a+a^{+})\\\hat{p}&=\mathrm{i}\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(a^{+}-a)\end{aligned} \tag{1.5.21}$$

立即可从(1.5.17)及(1.5.18)式得到

$$\begin{aligned}\langle n'|\hat{x}|n\rangle&=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}(\langle n'|a|n\rangle+\langle n'|a^{+}|n\rangle)\\&=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}[(n)^{\frac{1}{2}}\delta_{n',n-1}+(n+1)^{\frac{1}{2}}\delta_{n',n+1}]\end{aligned}$$

$$\langle n' \mid \hat{p} \mid n\rangle = \mathrm{i}\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(\langle n' \mid a^+ \mid n\rangle - \langle n' \mid a \mid n\rangle)$$
$$= \mathrm{i}\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\left[(n+1)^{\frac{1}{2}}\delta_{n',n+1} - (n)^{\frac{1}{2}}\delta_{n',n-1}\right] \tag{1.5.22}$$

得到的结果和(1.5.9)式完全一致. 但这里讨论的意义不仅如此,当我们用产出、湮灭算符来讨论谐振子系统时,对该系统的量子行为及图像会有更为深入及清晰的认识.

1.5.3 海森堡图像中的讨论

在二次量子化的理论框架下,物理系统随时间的演化规律常用算符随时间变化而态矢不随时间变化的海森堡图像来描述. 即算符随时间的变化满足以下的方程($\hbar=1$)

$$\frac{\partial \hat{o}(t)}{\partial t} = \mathrm{i}[\hat{H}, \hat{o}(t)]$$

现在我们就用一维谐振体系作为例子来讨论. 首先看谐振子的能量量子的湮灭及产生算符随时间如何变化.

$$\frac{\partial}{\partial t}a = \mathrm{i}[\hat{H}, a] = \mathrm{i}\omega[a^+ aa - aa^+a]$$
$$= \mathrm{i}\omega[a^+, a]a = -\mathrm{i}\omega a$$

得到

$$a(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}a \tag{1.5.23}$$

对上式取共轭得

$$a^+(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}a^+ \tag{1.5.24}$$

从这里的讨论再一次看出用“能量量子”的粒子图像及产生、湮灭算符的办法可以简捷、清晰地解一维谐振子的问题,因为在两个基本的算符随时间的变化规律完全求出后,由两个基本算符构成的其他物理量随时间的变化也都可以得到. 不仅如此,在应用二次量子化的方法将上述单个谐振子问题推广到讨论固体中原子的集体振动时还会更进一步显示出它的优越性. 这种原子集体振动的多种模式的能量量子称为声子.

1.5.4 声子

仍以简单的一维原子链为例. 其哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{K}{2}\sum_i (\hat{x}_i - \hat{x}_{i+1})^2 \tag{1.5.25}$$

其中 m 为原子质量,p_i 是第 i 个原子的动量算符,第二项是相邻原子间的相互作

用势，x_i 是第 i 个原子偏离平衡位置的位移，K 是耦合强度.

首先把这一问题回到经典的情形去讨论，在得到多种经典的振动模式后，再借助这些振动模式来讨论其量子理论.（1.5.25）式对应的经典运动方程为

$$-m\ddot{x}_l = m\omega^2 x_l = K(2x_l - x_{l-1} - x_{l+1}) \tag{1.5.26}$$

在上式中我们已假定所有格点上的原子都以相同的频率 ω 随 t 振动. 上式启发我们将原子的振幅取为如下形式

$$x_l = x_0 \cos(kal)$$

上式中的 l 为格点序号，a 为晶格常数，k 是波矢，于是有

$$\begin{aligned} 2x_l - x_{l-1} - x_{l+1} &= x_0[2\cos(kal) - \cos(kal + ka) - \cos(kal - ka)] \\ &= 2x_0 \cos(kal)(1 - \cos ka) \end{aligned}$$

代入（1.5.26）式得到各种集体振动模式的频率的表示为

$$\omega_k^2 = \frac{4K}{m}\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) \tag{1.5.27}$$

这一结果同时也说明设定的原子都按同一频率振动以及振幅随波矢分布的解是正确和自洽的形式.

有了上述的经典理论下求得的各种模式后，现在回到我们要讨论的量子理论. 受到以上经典讨论的启发我们将（1.5.25）式中的实空间的算符 $\hat{x}_l$ 及 $\hat{p}_l$ 变换到满足 N 原子链的周期性边界条件的波矢空间中的 $\hat{x}_k$ 及 $\hat{p}_k$，即

$$\begin{aligned} \hat{x}_l &= \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}}\sum_k e^{ikal}\hat{x}_k \\ \hat{p}_l &= \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}}\sum_k e^{-ikal}\hat{p}_k \end{aligned} \tag{1.5.28a}$$

$$\begin{aligned} \hat{x}_k &= \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}}\sum_l e^{-ikal}\,\hat{x}_l \\ \hat{p}_k &= \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}}\sum_k e^{ikam}\hat{p}_m \end{aligned} \tag{1.5.28b}$$

从（1.5.28a）式导出反变换（1.5.28b）式时利用了以下的等式

$$\frac{1}{N}\sum_l e^{ial(k'-k)} = \delta_{k',k} \tag{1.5.29}$$

利用上面的变换公式可证 $\hat{x}_k$ 及 $\hat{p}_k$ 也是一对正则算符，即由

$$[\hat{x}_l, \hat{p}_m] = i\delta_{lm}$$

可得

$$\begin{aligned} [\hat{x}_k, \hat{p}_{k'}] &= \frac{1}{N}\sum_{l,m} e^{-ikal} e^{ik'am}[\hat{x}_l, \hat{p}_m] \\ &= \frac{i}{N}\sum_{l,m} e^{-ikal} e^{ik'am}\delta_{l,m} \end{aligned}$$

$$= \frac{\mathrm{i}}{N}\sum_l \mathrm{e}^{\mathrm{i}al(k'-k)} = \mathrm{i}\delta_{k,k'} \tag{1.5.30}$$

(1.5.25)式中的势能项可改写成

$$\begin{aligned}\frac{K}{2}\sum_l (x_l - x_{l+1})^2 &= \frac{K}{2}\sum_k x_k x_{-k}(2-\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka})\\ &= K\sum_k x_k x_{-k}(1-\cos ka)\\ &= 2K\sum_k x_k x_{-k}\sin^2\frac{ka}{2}\\ &= \frac{m}{2}\sum_k \omega_k^2 x_k x_{-k}\end{aligned} \tag{1.5.31}$$

上式的最后一个等式用到(1.5.27)式，第一等式用到以下的关系式

$$\begin{aligned}\sum_l x_l x_{l+m} &= \frac{1}{N}\sum_{kk'} x_k x_{k'}\sum_l \mathrm{e}^{\mathrm{i}la(k+k')}\mathrm{e}^{\mathrm{i}mak}\\ &= \sum_{kk'} x_k x_{k'}\delta_{k',-k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}mak}\\ &= \sum_k x_k x_{-k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}mak}\end{aligned} \tag{1.5.32}$$

类似可得

$$\sum_l \hat{p}_l^2 = \sum_k \hat{p}_k\hat{p}_{-k} \tag{1.5.33}$$

利用(1.5.31)及(1.5.33)式可将(1.5.25)式改写成

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\sum_k \hat{p}_k\hat{p}_{-k} + \frac{m}{2}\sum_k \omega_k^2 x_k x_{-k} \tag{1.5.34}$$

至此我们就可以用类似前面讨论的一维谐振子时所用的产生、湮灭算符方法来处理这一问题了. 和前面不同的仅是要从原来的单模推广到多模的情形. 引入第 k 种模式的湮灭及产生算符

$$\begin{aligned}a_k &= \left(\frac{m\omega_k}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left(x_k + \frac{\mathrm{i}}{m\omega_k}\hat{p}_{-k}\right)\\ a_k^+ &= \left(\frac{m\omega_k}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left(x_{-k} - \frac{\mathrm{i}}{m\omega_k}\hat{p}_k\right)\end{aligned} \tag{1.5.35}$$

可证有以下的对易关系

$$\begin{aligned}&[a_k, a_{k'}^+] = \frac{-\mathrm{i}}{\hbar}[x_k, \hat{p}_{k'}] = \delta_{kk'}\\ &[a_k, a_{k'}] = 0\\ &[a_k^+, a_{k'}^+] = 0\end{aligned} \tag{1.5.36}$$

在引入不同模式的湮灭、产生算符以后(1.5.34)式很容易改写成对角化的形式

$$\hat{H}=\sum_k \omega_k\left(a_k^+ a_k+\frac{1}{2}\right)$$
$$=\sum_k \omega_k\left(\hat{n}_k+\frac{1}{2}\right) \tag{1.5.37}$$

因此,所有的能量本征态矢就都可得到,即

$$|n_{k_1},n_{k_2},\cdots,n_{k_n}\rangle=\prod_k \frac{(a_k^+)^{n_k}}{(n_k!)^{\frac{1}{2}}}|0\rangle \tag{1.5.38}$$

这种多原子体系集体运动模式的能量量子就叫声子. 这种声子体系包含了不同 k 模式的声子,和一维谐振子情形一样. 可以很容易导出在海森堡图像中 $a_k(t)$ 和 $a_k^+(t)$ 随时间的变化规律为

$$\begin{aligned} a_k(t)&=a_k \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_k t}\\ a_k^+(t)&=a_k^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_k t} \end{aligned} \tag{1.5.39}$$

从声子体系的讨论中我们可以清楚看到,对于多粒子体系问题,用二次量子化的方法显然要比用传统的波函数方法优越得多.

1.6　哈密顿量为二次形式的对角化

在前面的讨论中谈到,多体系统中的相互作用会使系统中粒子的状态发生变化,描述这一物理过程方便而又自然的办法是引入粒子状态的产生和湮灭算符以及粒子数算符. 此外,系统所有的物理过程以及所有的物理量都可用产生、湮灭算符表示. 可见二次量子化的最基本要素就是产生、湮灭算符. 在上面的讨论中我们用一维谐振子及一维原子链作为例子讨论了二次量子化的求解过程,从中我们看到只要把一个物理系统的哈密顿量最终表示成能量量子的能量值和相应的粒子数算符乘积之和的形式,那么系统的求解就得到了严格的结果,因为这时系统完备的能量本征态矢集都已得到了.

然而,大多数物理系统的哈密顿量用产生、湮灭算符表示时一般不是简单的 $\sum_i \hat{n}_i\varepsilon_i=\sum_i a_i^+ a_i\varepsilon_i$ 这样的二次型,因此大多数量子系统的求解是一个困难的问题. 当我们写出它们的哈密顿量时,常会看到用产生和湮灭算符表示出来的哈密顿量不仅不是上述的二次式而且也会包含产生和湮灭算符的高幂次项. 这就是量子体系严格求解的根本困难所在. 不过对于特殊的物理系统,若它们的哈密顿量能表示为产生和湮灭算符的一般形式的二次型时,对于这样的情形我们仍可找到严格求解的办法. 本节的内容就是讨论这类物理系统的严格求解问题. 它又常被称为物理系统的对角化.

1.6.1 Bogoliubov-Hopfield 变换

为了使讨论简单明了，我们以具有两种玻色模式 a_1, a_1^+ 和 a_2, a_2^+ 的物理系统为例，因为它是多模式系统中最简单的情形，并且在对两种模式的情况讨论清楚后，容易看出按相同的原则和办法可以将其推广到多模的情形. 这一简单的物理系统的哈密顿量的最一般表示为

$$
\begin{aligned}
H =& \delta_{11}a_1^+a_1 + \delta_{12}a_1^+a_2 + \delta_{13}a_1^+a_1^+ + \delta_{14}a_1^+a_2^+ \\
& + \delta_{21}a_2^+a_1 + \delta_{22}a_2^+a_2 + \delta_{23}a_2^+a_1^+ + \delta_{24}a_2^+a_2^+ \\
& + \delta_{31}a_1a_1 + \delta_{32}a_1a_2 + \delta_{33}a_1a_1^+ + \delta_{34}a_1a_2^+ \\
& + \delta_{41}a_2a_1 + \delta_{42}a_2a_2 + \delta_{43}a_2a_1^+ + \delta_{44}a_2a_2^+
\end{aligned}
\tag{1.6.1}
$$

在上式右方的 16 项中事实上有些项是可以合并的，例如 $\delta_{11}a_1^+a_1$ 和 $\delta_{33}a_1a_1^+$，$\delta_{32}a_1a_2$ 和 $\delta_{41}a_2a_1$ 等. 这里有意保留这种对称的形式是因为这样做更有利于下面将要谈到的求解方法.

针对(1.6.1)式表示的两玻色模式的二次型的哈密顿量，Bogoliubov 提出了将原有的 $a_1(a_1^+)$ 和 $a_2(a_2^+)$ 算符通过如下形式的线性变换变成两个新的玻色算符

$$
\begin{aligned}
A &= u_1a_1 + u_2a_2 + u_3a_1^+ + u_4a_2^+ \\
B &= v_1a_1 + v_2a_2 + v_3a_1^+ + v_4a_2^+
\end{aligned}
\tag{1.6.2}
$$

选择恰当的 $\{u_i\}$ 和 $\{v_i\}$ 使得该系统的哈密顿量用新的 $A(A^+)$ 和 $B(B^+)$ 表示出来后取如下的对角化的形式

$$
H = \omega_1 A^+ A + \omega_2 B^+ B + E_0 \tag{1.6.3}
$$

这样一来系统的严格解就得到了. 因为有了(1.6.3)式的哈密顿量形式，系统的所有能量本征值 $E_{n_1n_2}$

$$
E_{n_1n_2} = n_1\omega_1 + n_2\omega_2 + E_0 \tag{1.6.4}
$$

以及相应的能量本征态矢为 $|n_1, n_2\rangle$ 就都已经得到. 于是，对这样的物理系统的严格求解问题便归结为解(1.6.2)式中的系数 $\{u_i\}$ 和 $\{v_i\}$.

Hopfield 后来找到了一个系统求解 $\{u_i\}$ 和 $\{v_i\}$ 的方法：

(a) 由于 $a_1(a_1^+)$ 和 $a_2(a_2^+)$ 是两个独立的玻色算符，因此它们应满足如下的基本对易关系

$$
\begin{aligned}
&[a_1, a_1] = [a_1^+, a_1^+] = [a_2, a_2] = [a_2^+, a_2^+] = 0 \\
&[a_1, a_1^+] = [a_2, a_2^+] = 1 \\
&[a_1, a_2] = [a_1, a_2^+] = [a_1^+, a_2] = [a_1^+, a_2^+] = 0
\end{aligned}
\tag{1.6.5}
$$

变换后的新算符 $A(A^+)$，$B(B^+)$ 应当也是相互独立的两个玻色算符，所以它们也应满足

$$
[A, A^+] = 1
$$

$$[B,B^+]=1$$
$$[A,B]=[A,B^+]=0 \tag{1.6.6}$$

将(1.6.2)式中的 $A(A^+)$,$B(B^+)$用 $a_1(a_1^+)$,$a_2(a_2^+)$表示的关系式代入(1.6.6)式中并利用(1.6.5)式,便得到$\{u_i\}$,$\{v_i\}$需满足的必要条件

$$u_1^2+u_2^2+u_3^2+u_4^2=1$$
$$v_1^2+v_2^2+v_3^2+v_4^2=1 \tag{1.6.7}$$
$$u_1v_1+u_2v_2+u_3v_3+u_4v_4=0$$

(b) 把(1.6.2)式代入(1.6.3)式中,将它重新用 $a_1(a_1^+)$和 $a_2(a_2^+)$表示出来再和(1.6.1)式作比较,立即可得

$$\delta_{ij}=\omega_1u_iu_j+\omega_2v_iv_j \tag{1.6.8}$$

不过需要补充说明一点是,在作比较时我们是将(1.6.3)式中的 $H-E_0$ 和(1.6.1)式中的 H 相等得到的(1.6.8)式.那么我们要问为什么不用(1.6.3)式的 H 和(1.6.1)式的 H 直接相比呢?或者换句话说,在将原有的 $a_1(a_1^+)$,$a_2(a_2^+)$算符的 Hilbert 空间变换到新的 $A(A^+)$,$B(B^+)$算符的 Hilbert 空间时,H 作了一个 E_0 的能量零点调整.变换时能量零点变动的意义及必要性在矩阵法中没有明确的解释,这点将推迟到下一小节讨论新的对角化方法时回答.

(c) 引入一个 M 矩阵

$$[M]=\begin{bmatrix}\delta_{11} & \delta_{12} & \delta_{13} & \delta_{14}\\ \delta_{21} & \delta_{22} & \delta_{23} & \delta_{24}\\ \delta_{31} & \delta_{32} & \delta_{33} & \delta_{34}\\ \delta_{41} & \delta_{42} & \delta_{43} & \delta_{44}\end{bmatrix} \tag{1.6.9}$$

此外再把$\{u_i\}$,$\{v_i\}$写成列矩阵

$$[u]=\begin{bmatrix}u_1\\u_2\\u_3\\u_4\end{bmatrix}$$
$$[v]=\begin{bmatrix}v_1\\v_2\\v_3\\v_4\end{bmatrix} \tag{1.6.10}$$

可得到如下的关系式

$$[M][u]=\omega_1[u]$$
$$[M][v]=\omega_2[v] \tag{1.6.11}$$

上式的得到利用了(1.6.7)式和(1.6.8)式.我们取(1.6.11)式中第一等式的第 i

行为例来验算.

$$\begin{aligned}&\delta_{i1}u_1+\delta_{i2}u_2+\delta_{i3}u_3+\delta_{i4}u_4\\&=(\omega_1u_iu_1+\omega_2v_iv_1)u_1+(\omega_2u_iu_2+\omega_2v_iv_2)u_2\\&\quad+(\omega_1u_iu_3+\omega_2v_iv_3)u_3+(\omega_1u_iu_4+\omega_2v_iv_4)u_4\\&=\omega_1u_i(u_1^2+u_2^2+u_3^2+u_4^2)+\omega_2v_i(v_1u_1+v_2u_2+v_3u_3+v_4u_4)\\&=\omega_1u_i\end{aligned}$$

结论:(1.6.11)式是矩阵法的主要结果.即由原始的哈密顿量表示式(1.6.1)的二次式的系数 δ_{ij} 构成一个由(1.6.9)式表示的 M 矩阵,M 矩阵的本征矢中的矩阵元就是我们所需要的(1.6.2)式的变换系数.对于两个模式的系统,它的本征值就是 ω_1 和 ω_2,本征矢相应的是$[u]$和$[v]$.从以上的讨论看出,我们的确得到了一个系统的求解方法,即把求变换的问题变成了一个求矩阵本征值的问题.

1.6.2 双线性哈密顿量的一种新解法

从上一小节的讨论,Bogoliubov-Hopfield 变换的确是一个系统的方法.尽管讨论用了最简单的两模式的情形,但推广到更多的模式情形是直截了当的.对于 N 模的情形,只要把 M 矩阵从 4×4 的矩阵推广到 $2N\times2N$ 矩阵即可.不过,从单纯的计算繁复程度来看,当 N 较大时 M 矩阵的秩增大,一个秩很大的矩阵的本征矢及本征值的求解仍然是很困难的.那么我们会想,有没有可能将这一求解过程分成几个阶段,使每一阶段的求解过程都在较低阶或在可行性更佳的情形下进行呢?除此之外,在上面的讨论中留下(1.6.3)式中的 E_0 的物理意义还需要进一步弄清楚.它真的只是一个可有可无的能量零点的选择还是决定系统性质的一个重要的、确定的物理量?以上两点将在下面介绍的新的对角化方法中得到解答.

(a) 基态解.由于讨论的方法和上一小节不同,不需要像(1.6.1)式那样有意将二次式的哈密顿量写成对称的形式.为了简便起见,可将其中的一些项归并起来,所以普遍的两模的二次式可以化简为

$$\begin{aligned}H=&\delta_1a_1^\dagger a_1^\dagger+\delta_2a_1^\dagger a_1+\delta_3a_1a_1+\delta_4a_1^\dagger a_2^\dagger+\delta_5a_1^\dagger a_2+\delta_6a_1a_2^\dagger\\&+\delta_7a_1a_2+\delta_8a_2^\dagger a_2^\dagger+\delta_9a_2^\dagger a_2+\delta_{10}a_2a_2\end{aligned}\tag{1.6.12}$$

首先要指出的是这一系统具有如下形式的基态态矢

$$|\,\rangle=e^{\alpha a_1^\dagger a_1^\dagger+\beta a_1^\dagger a_2^\dagger+\gamma a_2^\dagger a_2^\dagger}\,|0\rangle\tag{1.6.13}$$

将(1.6.2)和(1.6.13)式代入定态方程中

$$H|\,\rangle=E_0|\,\rangle\tag{1.6.14}$$

得

$$\begin{aligned}&[\delta_1a_1^\dagger a_1^\dagger+\delta_4a_1^\dagger a_2^\dagger+\delta_8a_2^\dagger a_2^\dagger+\delta_2a_1^\dagger(2\alpha a_1^\dagger+\beta a_2^\dagger)+\delta_3(2\alpha+(2\alpha a_1^\dagger+\beta a_2^\dagger)^2)\\&+\delta_5a_1^\dagger(2\gamma a_2^\dagger+\beta a_1^\dagger)+\delta_6a_2^\dagger(2\alpha a_1^\dagger+\beta a_2^\dagger)+\delta_9a_2^\dagger(2\gamma a_2^\dagger+\beta a_1^\dagger)\\&+\delta_7(\beta+(2\alpha a_1^\dagger+\beta a_2^\dagger)(2\gamma a_2^\dagger+\beta a_1^\dagger))+\delta_{10}(2\gamma+(2\gamma a_2^\dagger+\beta a_1^\dagger)^2)\,|\rangle\\&=E_0\,|\rangle\end{aligned}\tag{1.6.15}$$

在导出上面的(1.6.15)式时用到了以下的运算结果

$$a_1|\rangle = a_1 e^{\alpha a_1^+ a_1^+ + \beta a_1^+ a_2^+ + \gamma a_2^+ a_2^+}\ |0\rangle$$

$$= a_1\left[1 + (\alpha a_1^+ a_1^+ + \beta a_1^+ a_2^+ + \gamma a_2^+ a_2^+) + \frac{1}{2!}(\alpha a_1^+ a_1^+ + \beta a_1^+ a_2^+ + \gamma a_2^+ a_2^+)^2 + \cdots\right]|0\rangle$$

$$= \left[2\alpha a_1^+ + \beta a_2^+ + (\alpha a_1^+ a_1^+ + \beta a_1^+ a_2^+ + \gamma a_2^+ a_2^+)a_1 + \frac{1}{2!}\cdot 2(2\alpha a_1^+ + \beta a_2^+)\right.$$

$$\cdot (\alpha a_1^+ a_1^+ + \beta a_1^+ a_2^+ + \gamma a_2^+ a_2^+) + \frac{1}{2!}(\alpha a_1^+ a_1^+ + \beta a_1^+ a_2^+ + \gamma a_2^+ a_2^+)^2 a_1 + \frac{1}{3!}$$

$$\cdot 3(2\alpha a_1^+ + \beta a_2^+)(\alpha a_1^+ a_1^+ + \beta a_1^+ a_2^+ + \gamma a_2^+ a_2^+)^2 + \frac{1}{3!}(\alpha a_1^+ a_1^+ + \beta a_1^+ a_2^+$$

$$\left. + \gamma a_2^+ a_2^+)^3 a_1 + \cdots\right]|0\rangle$$

$$= \left[2\alpha a_1^+ + \beta a_2^+ + (2\alpha a_1^+ + \beta a_2^+)(\alpha a_1^+ a_1^+ + \beta a_1^+ a_2^+ + \gamma a_2^+ a_2^+) + \frac{1}{2!}(2\alpha a_1^+\right.$$

$$\left. + \beta a_2^+)(\alpha a_1^+ a_1^+ + \beta a_1^+ a_2^+ + \gamma a_2^+ a_2^+)^2 + \cdots\right]|0\rangle$$

$$= (2\alpha a_1^+ + \beta a_2^+)\left[1 + (\alpha a_1^+ a_1^+ + \beta a_1^+ a_2^+ + \gamma a_2^+ a_2^+) + \frac{1}{2!}(\alpha a_1^+ a_1^+ + \beta a_1^+ a_2^+\right.$$

$$\left. + \gamma a_2^+ a_2^+)^2 + \cdots\right]|0\rangle$$

$$= (2\alpha a_1^+ + \beta a_2^+) e^{\alpha a_1^+ a_1^+ + \beta a_1^+ a_2^+ + \gamma a_2^+ a_2^+}\ |0\rangle = (2\alpha a_1^+ + \beta a_2^+)\ |\rangle \tag{1.6.16}$$

以及类似的

$$a_2\ |\rangle = (2\gamma a_2^+ + \beta a_1^+)\ |\rangle \tag{1.6.17}$$

$$a_1 a_2\ |\rangle = [\beta + (2\alpha a_1^+ + \beta a_2^+)(2\gamma a_2^+ + \beta a_1^+)]\ |\rangle \tag{1.6.18}$$

比较(1.6.15)式两端的$|\rangle$,$a_1^+ a_1^+|\rangle$,$a_1^+ a_2^+|\rangle$和$a_2^+ a_2^+|\rangle$四类态矢项.可得如下的四个等式

$$E_0 = 2\delta_3\alpha + \delta_7\beta + 2\delta_{10}\gamma \tag{1.6.19}$$

$$\delta_1 + 2\delta_2\alpha + 4\delta_3\alpha^2 + \delta_5\beta + 2\delta_7\alpha\beta + \delta_{10}\beta^2 = 0 \tag{1.6.20}$$

$$\delta_4 + \delta_2\beta + 4\delta_3\alpha\beta + 2\delta_5\gamma + 2\delta_6\alpha + \delta_7(4\alpha\gamma + \beta^2) + \delta_9\beta + 4\delta_{10}\beta\gamma = 0 \tag{1.6.21}$$

$$\delta_8 + \delta_3\beta^2 + \delta_6\beta + 2\delta_7\beta\gamma + 2\delta_9\gamma + 4\delta_{10}\gamma^2 = 0 \tag{1.6.22}$$

由以上的四个关于待定量 E_0,α,β,γ 的联立方程即可将它们求出,并由此看出由(1.6.13)式给出的基态解形式是正确的.

(b) 由上面的关于系统基态的讨论我们知道将原来的算符 $a_1(a_1^+)$,$a_2(a_2^+)$变换到对角化的 $A(A^+)$及 $B(B^+)$时,写出的对角化形式的哈密顿量必须是(1.6.3)

式的形式，即 $H=\omega_1 A^+ A+\omega_2 B^+ B+E_0$，这是因为如表示为 $H=\omega_1 A^+ A+\omega_2 B^+ B=\omega_1 \hat{n}_1+\omega_2 \hat{n}_2$，它的最低能态的能量是 $n_1=n_2=0$ 的态，即 $E_0=0$ 的态. 这就和上面得到的系统基态能一般是不为零的 E_0 相抵触. 因此我们得到的结论是(1.6.3)式的对角化形式中必须加上 E_0 这一项，而且它不是别的物理量，正是物理系统的基态能量.

(c) 前面讨论回答了(1.6.3)式中为什么有 E_0 项，而且明确了 E_0 就是系统的最低能态的能量值以及如何求解 E_0 和相应的态矢. 现在来讨论本小节开始时谈到的第二个问题，即我们能否将求解变换系数的矩阵的秩降低一些从而降低运算的复杂程度. 为此我们先来看一下(1.6.3)式

$$H=\omega_1 A^+ A+\omega_2 B^+ B+E_0$$

还会告诉我们什么样的更多的物理含义. 前面已得到的结果是系统具有一个最低能态 $|\rangle$，其相应的能量值是 E_0. 这个态矢在 $A(A^+)$ 和 $B(B^+)$ 的新的 Hilbert 空间里是一个什么样的态矢？它在新的 Hilbert 空间里对应于 $|n_1=0, n_2=0\rangle$ 的态矢，也就是说，它是新的 Hilbert 空间的真空态，即

$$|\rangle=|0\rangle_{(AB)} \tag{1.6.23}$$

因此它应有如下的性质

$$A|\rangle=B|\rangle=A|0\rangle_{(AB)}=B|0\rangle_{(AB)}=0 \tag{1.6.24}$$

以 $A|\rangle=0$ 为例来看会有什么样的结果.

$$\begin{aligned} A|\rangle=0&=(u_1 a_1+u_2 a_2+u_3 a_1^+ + u_4 a_2^+)\cdot \mathrm{e}^{\alpha a_1^+ a_1^+ +\beta a_1^+ a_2^+ +\gamma a_2^+ a_2^+}|0\rangle \\ &=[u_1(2\alpha a_1^+ +\beta a_2^+)+u_2(2\gamma a_2^+ +\beta a_1^+)+u_3 a_1^+ + u_4 a_2^+] \\ &\quad \cdot \mathrm{e}^{\alpha a_1^+ a_1^+ +\beta a_1^+ a_2^+ +\gamma a_2^+ a_2^+}|0\rangle \end{aligned} \tag{1.6.25}$$

比较左、右方的 $a_1^+ \mathrm{e}^{\alpha a_1^+ a_1^+ +\beta a_1^+ a_2^+ +\gamma a_2^+ a_2^+}|0\rangle$ 及 $a_2^+ \mathrm{e}^{\alpha a_1^+ a_1^+ +\beta a_1^+ a_2^+ +\gamma a_2^+ a_2^+}|0\rangle$ 得

$$\begin{aligned} u_3+2\alpha u_1+\beta u_2&=0 \\ u_4+2\gamma u_2+\beta u_1&=0 \end{aligned} \tag{1.6.26}$$

即

$$\begin{aligned} u_3&=-2\alpha u_1-\beta u_2 \\ u_4&=-2\gamma u_2-\beta u_1 \end{aligned} \tag{1.6.27}$$

可见借助于认识到 $|\rangle=|0\rangle_{AB}$ 是 A、B 的 Hilbert 空间的真空态我们便能得到 u_3，u_4 依赖于 u_1，u_2 的关系，这样一来真正的待求量就只有两个独立的了. 说得更清楚一点，由于(1.6.27)和(1.6.11)式的第一个本征矩阵方程中的待求量就只有两个了. 比起直接解(1.6.11)式的第一个方程的四个待求量减少了一半. 在模式较多时这种做法对求解会有较大的帮助.

(d) 我们也可以不必再回到(1.6.11)式的 B-H 矩阵法去求解，而是利用现在讨论的方法直接导出 $u_1(u_2)$ 和 $v_1(v_2)$ 满足的本征方程组. 仍以 $A(A^+)$ 为例.

第一步:找出第一激发态 $A^+|\rangle$的具体表示式

$$A^+|\rangle=(u_1a_1^++u_2a_2^++u_3a_1+u_4a_2)e^{\alpha a_1^+a_1^++\beta a_1^+a_2^++\gamma a_2^+a_2^+}|0\rangle$$
$$=[(u_1+2\alpha u_3+\beta u_4)a_1^++(u_2+2\gamma u_4+\beta u_3)a_2^+]\cdot e^{\alpha a_1^+a_1^++\beta a_1^+a_2^++\gamma a_2^+a_2^+}|0\rangle \tag{1.6.28}$$

第二步:将(1.6.27)式代入(1.6.28)式得到 $A^+|\rangle$只由 u_1,u_2 表示的式子.

$$A^+|\rangle=\{[(1-4\alpha^2-\beta^2)u_1-2\beta(\alpha+\gamma)u_2]a_1^+ +[(1-4\gamma^2-\beta^2)u_2-2\beta(\alpha+\gamma)u_1]a_2^+]\}e^{\alpha a_1^+a_1^++\beta a_1^+a_2^++\gamma a_2^+a_2^+}|0\rangle \tag{1.6.29}$$

引入

$$\varphi_1=1-4\alpha^2-\beta^2$$
$$\varphi_2=1-2\beta(\alpha+\gamma) \tag{1.6.30}$$
$$\varphi_3=1-4\gamma^2-\beta^2$$

(1.6.29)式改写成

$$A^+|\rangle=[(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]\cdot e^{\alpha a_1^+a_1^++\beta a_1^+a_2^++\gamma a_2^+a_2^+}|0\rangle \tag{1.6.31}$$

第三步:按对角化后的(1.6.3)式应有

$$H(A^+|\rangle)=(\omega+E_0)(A^+|\rangle) \tag{1.6.32}$$

将(1.6.31)式代入上式.并将(1.6.12)式的 H 表示式代入上式的左方,通过一定的运算后可得(见附录)

$$\begin{aligned}H(A^+|\rangle)=&[\delta_2(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++4\alpha\delta_3(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^+\\&+2\delta_3\beta(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_2^++\delta_5(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_1^++\delta_6(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_2^+\\&+\delta_7\beta(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++2\delta_7\gamma(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_2^++2\delta_7\alpha(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_1^+\\&+\delta_7\beta(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^++\delta_9(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^++2\delta_{10}\beta(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_1^+\\&+4\delta_{10}\gamma(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]|\rangle+[(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^+\\&+(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]H]|\rangle\\=&(\omega+E_0)[(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]|\rangle\end{aligned} \tag{1.6.33}$$

消去上式两方的

$$[(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]H|\rangle$$
$$=E_0[(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]|\rangle$$

后,剩下的部分再分别比较 $a_1^+|\rangle$和 $a_2^+|\rangle$的系数得

$$(\delta_2+4\alpha\delta_3+\delta_7\beta)(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)+(\delta_5+2\delta_7\alpha+2\delta_{10}\beta)(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)=\omega(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2) \tag{1.6.34}$$

$$(\delta_9+\delta_7\beta+4\delta_{10}\gamma)(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)+(\delta_6+2\delta_3\beta+2\delta_7\gamma)(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)=\omega(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1) \tag{1.6.35}$$

最后归结为由(1.6.34)和(1.6.35)两式去解 u_1, u_2.

现在作一简短的小结：

(a) (1.6.34)和(1.6.35)式就是用新方法得到的直接解 u_1, u_2, ω 的两个联立方程，这就是对提出的第二个问题的解答：不需解 u_1, u_2, u_3, u_4，只需解 u_1, u_2.

(b) 虽然只是用 $A(A^+)$ 的形式在推导，但实际上在解(1.6.34)和(1.6.35)式时会得到 ω_1, ω_2 两个解，因此自然就把 $B(B^+)$ 的结果带了进来.

(c) 从推演的过程看，新方法虽然减少了待定量的数目，但它的代价是用了较多的解析推导步骤. 在 $N=2$ 的情况下 B-H 方法显得直接、简便，待求量也不算多. 但在 N 较大时后面的方法就一定会显出它的优越性来了.

(d) B-H 方法的特点是巧妙地利用变换前后两组玻色算符的基本对易关系的特性，而后一种方法是从哈密顿量算符出发求基态及激发谱的物理性质来讨论的. 它除了完成对角化的任务外，同时也得到了所有的激发态的态矢表示. 后面一点是 B-H 方法中没有涉及的.

附　录

(1.6.31)式的推导

为了看得更清楚，将 H 中的每一项对

$$[(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ + (\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_2^+]|\rangle$$

作用的结果分别列于下面.

(1) $\delta_1 a_1^+ a_1^+ [(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ + (\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_2^+]|\rangle$
$= [(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ + (\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_2^+]\delta_1 a_1^+ a_1^+ |\rangle$

(2) $\delta_2 a_1^+ a_1 [(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ + (\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_2^+]|\rangle$
$= \delta_2(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ |\rangle + [(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ + (\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_2^+]\delta_2 a_1^+ a_1 |\rangle$

(3) $\delta_3 a_1 a_1 [(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ + (\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_2^+]|\rangle$
$= 2\delta_3(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1 |\rangle + [(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ + (\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_2^+]\delta_3 a_1 a_1 |\rangle$
$= 2\delta_3(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)(2\alpha a_1^+ + \beta a_2^+)|\rangle$
$\quad + [(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ + (\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_2^+]\delta_3 a_1 a_1 |\rangle$

(4) $\delta_4 a_1^+ a_2^+ [(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ + (\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_2^+]|\rangle$
$= [(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ + (\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_2^+]\delta_4 a_1^+ a_2^+ |\rangle$

(5) $\delta_5 a_1^+ a_2 [(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ + (\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_2^+]|\rangle$
$= \delta_5(\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_1^+ |\rangle + [(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ + (\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_2^+]\delta_5 a_1^+ a_2 |\rangle$

(6) $\delta_6 a_2^+ a_1 [(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ + (\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_2^+]|\rangle$
$= \delta_6(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_2^+ |\rangle + [(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ + (\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_2^+]\delta_6 a_2^+ a_1 |\rangle$

(7) $\delta_7 a_1 a_2 [(\varphi_1 u_1 - \varphi_2 u_2)a_1^+ + (\varphi_3 u_2 - \varphi_2 u_1)a_2^+]|\rangle$

$$=\delta_7(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_2|\rangle+\delta_7(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_1|\rangle$$
$$+[(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]\delta_7a_1a_2|\rangle$$
$$=\delta_7(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)(2\gamma a_2^++\beta a_1^+)+\delta_7(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)(2\alpha a_1^++\beta a_2^+)$$
$$+[(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]\delta_7a_1a_2|\rangle$$

(8) $\delta_8a_2^+a_2^+[(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]|\rangle$

$$=[(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]\delta_8a_2^+a_2^+|\rangle$$

(9) $\delta_9a_2^+a_2[(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]|\rangle$

$$=\delta_9(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+|\rangle+[(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]\delta_9a_2^+a_2|\rangle$$

(10) $\delta_{10}a_2a_2[(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]|\rangle$

$$=2\delta_{10}(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)(2\alpha a_2^++\beta a_1^+)|\rangle+[(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^+$$
$$+(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]\delta_{10}a_2a_2|\rangle$$

综合以上的计算有

$$\begin{aligned}H(A^+|\rangle)=\ &[\delta_2(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++4\alpha\delta_3(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^+\\&+2\delta_3\beta(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++2\delta_5(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_1^+\\&+2\delta_6\alpha(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_2^++\delta_7\beta(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^+\\&+2\delta_7\gamma(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_2^++2\delta_7\alpha(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_1^+\\&+\delta_7\beta(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^++\delta_9(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+\\&+2\delta_{10}\beta(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_1^++4\delta_{10}\alpha(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]|\rangle\\&+[(\varphi_1u_1-\varphi_2u_2)a_1^++(\varphi_3u_2-\varphi_2u_1)a_2^+]H|\rangle\end{aligned}$$

第 2 章　相对论量子理论方程

上一章的主要目的是将单粒子的量子力学推广到多粒子体系，其中引入湮灭、产生算符这样的理论工具是一个重要的手段. 在本章里将从另一个角度作量子理论的推广，即将低粒子速度时适用的非相对论量子力学推广到粒子速度接近光速时的相对论量子力学. 在非相对论量子力学中描述演化规律的动力学方程是薛定谔方程，在该方程中出现的是对时间的一次微商和对空间的二次微商. 这种情况显然不满足相对论时-空对称的协变性原理，因此要把量子力学理论和相对论协调起来的首要工作是建立符合时空协变性的动力学方程. 从这样的原则出发考虑如何构建协变的 Klein-Gordon 方程（K-G 方程）和Dirac方程以及与它们有关的讨论将是本章的主要内容.

2.1　K-G 方程

在讨论 K-G 方程之前先回顾一下相对论的一些重要内容.

如采取欧氏度规

$$\eta_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} \quad (\mu,\nu = 1,2,3,4)$$

则四维坐标取作　$\boldsymbol{x}_\mu = (\boldsymbol{x}, \mathrm{i}ct)$

四维动量为　$\boldsymbol{p}_\mu = (\boldsymbol{p}, \mathrm{i}E/c)$

四维流矢量为　$\boldsymbol{j}_\mu = (\boldsymbol{j}, \mathrm{i}c\rho)$

四维电磁势为　$\boldsymbol{A}_\mu = (\boldsymbol{A}, \mathrm{i}\varphi)$

质能关系为　$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4$

有了上述简短回顾后，我们现在开始讨论相对论量子理论的动力学方程的建立. 根据在非相对论性量子力学中的量子化办法，即把三维的动量 $\boldsymbol{p}$ 转变成算符，$\boldsymbol{p} \to \hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$，最自然的量子理论的相对论化是将四维动量同样地算符化，即

$$\begin{aligned} \boldsymbol{p} &\to -\mathrm{i}\hbar\nabla \\ E &= -\mathrm{i}cp_4 \to (-\mathrm{i}c)(-\mathrm{i}\hbar\partial_4) \\ &= (-\mathrm{i}c)(-\mathrm{i}\hbar)\left(\frac{\partial}{\partial_{\mathrm{i}ct}}\right) \\ &= \mathrm{i}\hbar\partial_t \end{aligned}$$

同时把非相对论的质能关系（自由粒子）

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

写成的量子力学方程(薛定谔方程)

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)|\,t\rangle=\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)|\,t\rangle$$

改用相对论的质能关系

$$E^2=c^2p^2+m^2c^4$$

写成一个相对论的量子力学方程

$$(\mathrm{i}\hbar\partial_t)^2\psi=[c^2\ (-\mathrm{i}\hbar\nabla)^2+m^2c^4]\psi$$

即

$$-\hbar^2\partial_t^2\psi=(-\hbar^2c^2\nabla^2+m^2c^4)\psi \tag{2.1.1}$$

这就是 Klein-Gordon 方程. 从这一方程出发下面我们将作一些讨论.

2.1.1　K-G 方程的平面波解

假定 K-G 方程有平面波解

$$\psi=A\mathrm{e}^{\sum\limits_{\mu}\mathrm{i}k_\mu x_\mu}=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)} \tag{2.1.2}$$

上式中第二等式的得来如下:这里的波矢 $\boldsymbol{k}_\mu$ 和四动量 $\boldsymbol{P}_\mu$ 间有如下的关系

$$\boldsymbol{k}_\mu=\frac{\boldsymbol{P}_\mu}{\hbar}\quad 即\begin{cases}\boldsymbol{k}=\dfrac{\boldsymbol{P}}{\hbar}\\ k_4=\dfrac{P_4}{\hbar}=\dfrac{\mathrm{i}E}{c\hbar}=\dfrac{\mathrm{i}\hbar\omega}{c\hbar}=\mathrm{i}\,\dfrac{\omega}{c}\end{cases} \tag{2.1.3}$$

所以有

$$k_\mu x_\mu=\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}+\mathrm{i}\,\frac{\omega}{c}\cdot(\mathrm{i}ct)=\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t \tag{2.1.4}$$

将(2.1.2)式代入(2.1.1)式得

$$\hbar^2\omega^2\psi=(\hbar^2c^2k^2+m^2c^4)\psi$$

消去 ψ 后得到如下的质能关系

$$E^2=c^2p^2+m^2c^4$$

即是说如要求(2.1.2)式是正确的平面波解,则粒子的质能关系必须符合以上的条件. 进一步由上式得

$$E=\pm\sqrt{c^2p^2+m^2c^4}$$

虽然上式的正号解正是我们期望的正确的相对论质能关系,但它同时却给出了物理上不合理的负能解. 因为当有负能解的存在时,粒子不可能稳定,它将一直向更负的能级跃迁.

其次再对 Klein-Gordon 方程

$$\sum_\mu\partial_\mu^2\psi=\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi \tag{2.1.1a}$$

取复数共轭得

$$\sum_{\mu} \partial_{\mu}{}^{2} \psi^{*} = \frac{m^{2} c^{2}}{\hbar^{2}} \psi^{*} \tag{2.1.1b}$$

作 $\psi^{*} \cdot$(2.1.1a)−(2.1.1b)$\cdot \psi$ 可得

$$\psi^{*} \left(\sum_{\mu} \partial_{\mu}{}^{2}\right) \psi - \sum_{\mu} \left(\partial_{\mu}{}^{2} \psi^{*}\right) \psi = 0$$

即

$$\sum_{\mu} \partial_{\mu} (\psi^{*} \partial_{\mu} \psi - \psi \partial_{\mu} \psi^{*}) = 0 \tag{2.1.5a}$$

如定义四维流密度如下

$$j_{\mu} = \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}} (\psi^{*} \partial_{\mu} \psi - \psi \partial_{\mu} \psi^{*}) \tag{2.1.6a}$$

则(2.1.5a)式表现为连续方程

$$\partial_{\mu} j_{\mu} = 0 \tag{2.1.5b}$$

不过仔细分析一下引入的四维流密度，发现

$$\boldsymbol{j} = \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im}(\psi^{*} \nabla \psi) \tag{2.1.6b}$$

看做三维流密度是没有问题的(上式中的 Im 系指取后面量的虚部)；然而 j_4 或相应的 ρ

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{j_4}{\mathrm{i}c} = \frac{1}{\mathrm{i}c} \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im}(\psi^{*} \partial_{x_4} \psi) \\ &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}cm} \frac{1}{\mathrm{i}c} \mathrm{Im}(\psi^{*} \partial_t \psi) \\ &= -\frac{\hbar}{mc^{2}} \mathrm{Im}(\psi^{*} \partial_t \psi) \end{aligned} \tag{2.1.6c}$$

却由于上式的右方既可为正也可为负，不能解释为几率密度. 这样 K-G 方程既遇到了负能量又遇到了负几率密度的困难，因此历史上在一段时间里几乎将它放弃掉. 不过，后来发现在量子理论中作二次量子化后它给出了标量场的正确描述，此外它在非相对论极限下仍能得出物理上合理的结果，所以 K-G 方程仍然是一个有一定意义的相对论方程.

2.1.2 非相对论极限

从经典的相对论可知，在粒子速度小时，即 $\frac{v}{c} \ll 1$ 时，能量可近似表示为 $E \approx mc^{2} + \frac{p^{2}}{2m}$. 根据这一启示，就像在一般量子理论中作定态解那样把波函数中的静能量 mc^{2} 分出来，所不同的是剩下的波函数部分对应于另一部分能量，这部分的波函数既是 $\boldsymbol{r}$ 的函数也和 t 有关，因此这时我们将波函数写成

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \varphi(\boldsymbol{r}, t) \mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}mc^{2}t}{\hbar}} \tag{2.1.7}$$

将上式两端用 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$作用得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi+mc^2\varphi\right)e^{\frac{-imc^2t}{\hbar}} \tag{2.1.8}$$

可以这样来理解上式:把它与现在讨论的非相对论极限作比较,可见 $mc^2\varphi$ 应对应于能量的 mc^2 部分,而 $i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}$应对应于$\frac{p^2}{2m}$部分. 因此,在非相对论极限下可以得出如下关系

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}\ll mc^2\varphi \tag{2.1.9}$$

将 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$再作用(2.1.8)式一次得

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=\left[-\hbar^2\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}+2mc^2 i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}+m^2c^4\varphi\right]e^{\frac{-imc^2t}{\hbar}} \tag{2.1.10a}$$

右方括号内的三项按(2.1.9)式的不等式来看,以第三项为标准,第二项是一阶小量,第一项是二阶小量. 所以可略去第一项,保留第二项的一阶小量,得到

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}\approx\left[2i\hbar mc^2\frac{\partial\varphi}{\partial t}+m^2c^4\varphi\right]e^{\frac{-imc^2t}{\hbar}} \tag{2.1.10b}$$

将上式及(2.1.7)式代入 K-G 方程,有

$$\left[2i\hbar mc^2\frac{\partial\varphi}{\partial t}+m^2c^4\varphi\right]e^{\frac{-imc^2t}{\hbar}}=[-\hbar^2c^2\nabla^2\varphi+m^2c^4\varphi]e^{\frac{-imc^2t}{\hbar}} \tag{2.1.11}$$

两端消掉相同的项及共同的因子,得

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi \tag{2.1.12}$$

便回到了非相对论的薛定谔方程. 不仅如此,在非相对论极限下,几率密度 ρ 化成

$$\begin{aligned}\rho&=-\frac{\hbar}{mc^2}\mathrm{Im}(\psi^*\partial_t\psi)\\&=-\frac{\hbar}{mc^2}\mathrm{Im}\left[\varphi^* e^{\frac{imc^2t}{\hbar}}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t}-i\frac{mc^2}{\hbar}\varphi\right)e^{\frac{-imc^2t}{\hbar}}\right]\\&=-\frac{\hbar}{mc^2}\mathrm{Im}\left[\varphi^*\left(\partial_t\varphi-i\frac{mc^2}{\hbar}\varphi\right)\right]\\&=-\frac{\hbar}{mc^2}\mathrm{Im}\left(-i\frac{mc^2}{\hbar}\varphi^*\varphi\right)\\&=\mathrm{Im}(i\varphi^*\varphi)\\&=\varphi^*\varphi\end{aligned} \tag{2.1.13}$$

在此过程中按(2.1.9)式的不等式在非相对论近似下果然得到了原来的非相对论量子理论的几率表示式. 综合以上讨论可得出如下结论:K-G 方程可以给出正确的非相对论极限情形.

2.2　Dirac 方程

针对 K-G 方程具有负能量、负几率密度等物理上不合理的缺点，Dirac 试图另外建立一个既没有上述缺陷又符合协变性要求的相对论性量子力学的动力学方程.

2.2.1　Dirac 方程的建立

(a) 分析一下 K-G 方程可知，负几率密度($\psi^* \partial_t \psi$)是因为 K-G 方程中含有 t 的二次微商造成的，所以首要的一点是希望建立的方程只含 t 的一次微商.

(b) 如果要求相对论方程只含 t 的一次微商，则从协变性要求来看，对空间变量的微商也应该是一次的.

除此之外，若还要希望保持薛定谔方程的形式

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \tag{2.2.1}$$

$\hat{H}$ 按上面的考虑也只能含空间变量的一次微商，所以 $\hat{H}$ 必须写成 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 算符的一次式

$$\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} + mc^2\beta \tag{2.2.2}$$

如果我们和以往讨论非相对论性量子理论那样也对这一方程寻求平面波解

$$\psi = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)} \tag{2.2.3}$$

代入(2.2.1)式有

$$(E - c\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} - \beta mc^2)\psi = 0 \tag{2.2.4}$$

将上式左乘以($E + c\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} + \beta mc^2$)得

$$\begin{aligned}\{E^2 &- c^2[\alpha_x^2 p_x^2 + \alpha_y^2 p_y^2 + \alpha_z^2 p_z^2 + (\alpha_x\alpha_y + \alpha_y\alpha_x)p_x p_y \\ &+ (\alpha_y\alpha_z + \alpha_z\alpha_y)p_y p_z + (\alpha_z\alpha_x + \alpha_x\alpha_z)p_z p_x] - m^2c^4\beta^2 \\ &- mc^3[(\alpha_x\beta + \beta\alpha_x)p_x + (\alpha_y\beta + \beta\alpha_y)p_y + (\alpha_z\beta + \beta\alpha_z)p_z]\psi = 0\end{aligned} \tag{2.2.5}$$

从(2.2.5)式看出，如果要想得到正确的相对论质能关系 β 必须满足以下条件

$$\begin{aligned}&\alpha_x^2 = \alpha_y^2 = \alpha_z^2 = \beta^2 = 1 \\ &\alpha_x\alpha_y + \alpha_y\alpha_x = \alpha_y\alpha_z + \alpha_z\alpha_y = \alpha_z\alpha_x + \alpha_x\alpha_z = 0 \\ &\alpha_x\beta + \beta\alpha_x = \alpha_y\beta + \beta\alpha_y = \alpha_z\beta + \beta\alpha_z = 0\end{aligned} \tag{2.2.6}$$

在得到(2.2.6)式时我们有意地保持 α_i，β 的乘积次序，这样做的原因从下面的讨论可以清楚看出. 上面的第一式没有什么特别的地方，因为普通的数就可以满足. 但是，第二式及第三式说明要 α_x，α_y，α_z，β 间两两相互反对易，这就肯定它们不可能是普通数，这就是为什么在写出(2.2.5)式时有意保留它们的次序的原因. 一个恰当而简单的方案是将它们表示为数的矩阵，因为矩阵可以满足反对易关系. 下面继

续讨论(2.2.6)式中 α 及 β 都是矩阵的详细内容及含义.

(a) $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 应当是方阵. 因为哈密顿量是厄米算符,即 $\hat{H}=\hat{H}^{+}$. 当 $\hat{H}$ 取共轭时,$\hat{H}$ 中的矩阵应当变成它们的共轭矩阵,这就要求 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 也是厄米矩阵. 只有方阵才可能是厄米矩阵.

(b) 根据(2.2.6)式的第二式及第三式的两两反对易的关系可知,$\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 必须是四个独立的 $N\times N$ 矩阵.

(c) N 必须为偶数:可以任取其中一个反对易关系

$$\alpha_i\alpha_j=-\alpha_j\alpha_i$$

来看. 取上式左、右方的行列式得

$$\det(\alpha_i\alpha_j)=\det(-\alpha_j\alpha_i)=\det(-I\cdot\alpha_j\cdot\alpha_i)$$

再利用矩阵行列式的性质得

$$\det(\alpha_i)\cdot\det(\alpha_j)=\det(-I)\cdot\det(\alpha_i)\cdot\det(\alpha_j)$$

这要求

$$\det(-I)=1$$

即

$$(-1)^N=1$$

因此 N 必为偶数.

(d) N 必须大于 2:前面已谈到 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 应当是四个互为独立又互为反对易的矩阵. 如果 $N=2$,2×2 的矩阵只能有三个独立并互为反对易的 $\boldsymbol{\sigma}$ 矩阵,即泡利矩阵,不能满足要求.

(e) 根据上面的讨论,最自然的考虑取 $N=4$,可以直接验证如下选定的 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 就满足(2.2.6)式的所有要求.

$$\boldsymbol{\alpha}=\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix}\qquad \boldsymbol{\beta}=\begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & -I\end{pmatrix}\tag{2.2.7}$$

不过要指出的是这只是一种选择,还可以选定其他的矩阵表示.

(f) 值得着重指出的是,$\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 是 4×4 的矩阵这一点说明 Dirac 方程的波函数不是普通的一个函数,而是四个一列的波函数,即

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}\tag{2.2.8}$$

这个结论告诉我们 Dirac 原本是想建立一个克服 K-G 方程中负几率密度的相对论方程,结果是虽然达到了这个目的,但建立的 Dirac 方程却不是 K-G 方程处理的物理系统,而是一个具有四个内部自由度(分量)的物理系统.

2.2.2 粒子的内部自由度——自旋

在上一节里已谈到，Dirac 方程与 K-G 方程之间的不同点是前者描述的系统是包含四个内部自由度或四分量波函数的粒子，而后者是波函数只有一个分量的粒子. 下面我们将指出从物理的实质来看，前者描绘了具有自旋的费米子的动力学行为而后者描绘的是无自旋玻色子的动力学规律. 现在就来讨论 Dirac 方程中粒子的内部自由度为什么描述的是自旋.

(a) 首先来看 Dirac 方程是否能给出动量守恒的结论. 因为现在写出的方程没有包含任何外势的作用，它是描述自由的相对论性粒子的方程，所以动量应当守恒. 可证明如下：由于$\hat{\boldsymbol{p}}$与一个数矩阵$mc^2\beta$自然是可对易的，因此

$$[\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}]=[\hat{\boldsymbol{p}},c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+mc^2\beta]=0$$

可见，$\hat{\boldsymbol{p}}$与$\hat{H}$对易，$\hat{\boldsymbol{p}}$是守恒量. 动量守恒成立.

(b) 角动量是否也守恒. 要回答这一问题，先看一下轨道角动量的变化率

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\hat{l}_x}{\mathrm{d}t}&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{l}_x,\hat{H}]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[(y\hat{p}_z-z\hat{p}_y),c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta]\\&=\frac{c}{\mathrm{i}\hbar}[(y\hat{p}_z-z\hat{p}_y),c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}]\\&=\frac{c}{\mathrm{i}\hbar}\{[y,\alpha_y\hat{p}_y]\hat{p}_z-[z,\alpha_z\hat{p}_z]p_y\}\\&=c(\alpha_yp_z-\alpha_zp_y)\end{aligned}$$

$\dfrac{\mathrm{d}\hat{l}_y}{\mathrm{d}t}$及$\dfrac{\mathrm{d}\hat{l}_z}{\mathrm{d}t}$的结果类似. 合并写成

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\boldsymbol{l}}}{\mathrm{d}t}=c(\boldsymbol{\alpha}\times\hat{\boldsymbol{p}})\tag{2.2.9}$$

这个结果表明，如果 Dirac 方程描述的粒子只具有轨道角动量，则角动量就不会守恒. 但角动量守恒对于自由的粒子来说是应当成立的. 解决这一疑难唯一的出路是 Dirac 方程描述的粒子应当还具有一种内禀的角动量——自旋. 为此，假定粒子的自旋角动量为

$$\boldsymbol{S}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}\tag{2.2.10}$$

其中

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\sigma}&0\\0&\boldsymbol{\sigma}\end{bmatrix}\tag{2.2.11}$$

在证明这种假定的正确性以及为下面的计算作准备之前，先看一下$\boldsymbol{\Sigma}$与$\boldsymbol{\alpha}$的对易关系. 应用(2.2.7)式的$\boldsymbol{\alpha}$的表达式，有

$$[\Sigma_i,\alpha_j]=\begin{bmatrix}0 & [\sigma_i,\sigma_j]\\ [\sigma_i,\sigma_j] & 0\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}0 & 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k\\ 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k & 0\end{bmatrix}=2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\alpha_k \tag{2.2.12}$$

根据上面的对易关系,可得自旋的时间变化率为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}S_i}{\mathrm{d}t}&=\frac{\hbar}{2}\cdot\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\Sigma_i,\hat{H}]=\frac{-\mathrm{i}}{2}[\Sigma_i,c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+mc^2\beta]\\&=-\frac{\mathrm{i}c}{2}[\Sigma_i,\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}]\\&=-\frac{\mathrm{i}c}{2}[\Sigma_i,\sum_j\alpha_j\hat{p}_j]\\&=-\frac{\mathrm{i}c}{2}\sum_j[\Sigma_i,\alpha_j]\hat{p}_j\\&=-\frac{\mathrm{i}c}{2}\sum_j 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\alpha_k\hat{p}_j\\&=-\sum_j c\varepsilon_{ijk}\alpha_k\hat{p}_j\\&=-c\,(\boldsymbol{\alpha}\times\hat{\boldsymbol{p}})_i\end{aligned} \tag{2.2.13}$$

结合(2.2.9)及(2.2.12)式知粒子轨道角动量及自旋之和的总角动量

$$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{S}} \tag{2.2.14}$$

是守恒的,此外由

$$\Sigma_z=\begin{bmatrix}\sigma_z & 0\\ 0 & \sigma_z\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&-1\end{bmatrix}$$

知 S_z 的本征值是$\pm\frac{1}{2}\hbar$,因此得到的结论是 Dirac 方程是描述自旋为$\frac{1}{2}$的粒子的相对论性方程.

2.2.3　Dirac 方程的平面波解

由于在自由电子的 Dirac 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi=(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+mc^2\beta)$$

中系统的哈密顿量与$\hat{\boldsymbol{p}}$对易

$$[\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}]=0$$

说明系统具有动量$\hat{\boldsymbol{p}}$与能量共同的本征态. 换句话说,Dirac 方程应当有如下的平

面波解

$$\psi = u(\boldsymbol{p})e^{\frac{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)}{\hbar}} \tag{2.2.15}$$

其中 $u(\boldsymbol{p})$是依赖于 $\boldsymbol{p}$ 的列矩阵. 将(2.2.15)式代入 Dirac 方程,得到 $u(\boldsymbol{p})$满足的矩阵方程

$$(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta)u(\boldsymbol{p}) = Eu(\boldsymbol{p}) \tag{2.2.16}$$

为简单计,把 $\boldsymbol{p}$ 的方向取作 z 方向,则(2.2.16)式中的 $\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}$ 简化为 $\alpha_z p$. 再将它写成明显的矩阵形式,得

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & cp & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -cp \\ cp & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -cp & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix} + mc^2\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix}$$
$$= E\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix} \tag{2.2.17}$$

上述的矩阵方程可以按行分别写成四个联立的方程组.

$$\begin{aligned} (mc^2-E)u_1+cpu_3 &= 0 \\ cpu_1-(mc^2+E)u_3 &= 0 \\ (mc^2-E)u_2-cpu_4 &= 0 \\ -cpu_2-(mc^2+E)u_4 &= 0 \end{aligned} \tag{2.2.18}$$

(2.2.18)式实质上分成了两组,u_1 与 u_3,u_2 与 u_4 耦合的方程组. 它们的有解条件为

$$\Delta = \begin{vmatrix} mc^2-E & \pm cp \\ \pm cp & -(mc^2+E) \end{vmatrix} = 0 \tag{2.2.19}$$

由上式可知这两组方程组有共同的能量本征值.

$$E_{\pm} = \pm\sqrt{m^2c^4+c^2p^2} \tag{2.2.20}$$

代回(2.2.18)式得

$$u_3 = \left[\frac{cp}{mc^2+E_{\pm}}\right]u_1 \tag{2.2.21}$$

$$u_4 = \left[\frac{-cp}{mc^2+E_{\pm}}\right]u_2 \tag{2.2.22}$$

从上两式来看平面波解仍未完全确定,它只给出 u_3 与 u_1,u_4 与 u_2 的关系,因而仍留下两个分量未定. 究其原因是源自量子理论中的一条基本规律,那就是量子态要完全确定下来需要把一个系统的物理量完全集中的所有量子数都确定下来. 在寻

求平面波解时定下了动量 $\boldsymbol{p}$，又从方程(2.2.20)确定了 E，然而只是 $\boldsymbol{p}$ 与 E 还构不成一个完全集，要成为完全集还需要加上角动量量子数.

因为已选 $\boldsymbol{p}$ 的方向为 z 方向，$p_x = p_y = 0$. 所以

$$l_z = xp_y - yp_x = 0$$

这时角动量的 z 方向分量为

$$j_z = S_z = \frac{\hbar}{2}\Sigma_z \tag{2.2.23}$$

因此要完全确定平面波解还需要该解同时也是 j_z(即Σ_z)的本征态. 而Σ_z 的本征值只有±1 两个值，为此现在再加上这一条件

$$\Sigma_z \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix} = \pm \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix} \tag{2.2.24}$$

由上式得

$$u_1 = \pm u_1, \ -u_2 = \pm u_2, u_3 = \pm u_3, \ -u_4 = \pm u_4 \tag{2.2.25}$$

由(2.2.25)式得出如下的结论：$\begin{cases} \text{如 } S_z \text{ 取作} \dfrac{\hbar}{2} & \text{则} \quad u_2, u_4 = 0 \quad u_1 \text{ 可取为 } 1 \\ \text{如 } S_z \text{ 取作} -\dfrac{\hbar}{2} & \text{则} \quad u_1, u_3 = 0 \quad u_2 \text{ 可取为 } 1 \end{cases}$

这样解就完全确定下来了，共有四种，它们分别是

$$\boldsymbol{p}, E = E_+, S_z = \frac{\hbar}{2} \qquad u^{(1)} = N \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{cp}{mc^2 + E_+} \\ 0 \end{bmatrix} \tag{2.2.26a}$$

$$\boldsymbol{p}, E = E_+, S_z = -\frac{\hbar}{2} \qquad u^{(2)} = N \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dfrac{-cp}{mc^2 + E_+} \end{bmatrix} \tag{2.2.26b}$$

$$\boldsymbol{p}, E = E_-, S_z = \frac{\hbar}{2} \qquad u^{(3)} = N \begin{bmatrix} \dfrac{-cp}{mc^2 - E_-} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{2.2.26c}$$

$$p, E = E_-, S_z = -\frac{\hbar}{2} \qquad u^{(4)} = N\begin{bmatrix} 0 \\ \dfrac{cp}{mc^2 - E_-} \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{2.2.26d}$$

上面四个式中的归一化因子 N 皆为

$$N = \left[1 + \frac{c^2 p^2}{(mc^2 + |E|)^2}\right]^{-\frac{1}{2}} \tag{2.2.27}$$

从平面波解的讨论中可以看到，尽管 Dirac 方程克服了 K-G 方程负几率密度的困难，但负能量的解依然存在

$$E_- = -\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$$

随着 p 的增大，能量取负的更大的值. 其结果是任何能量(包括负能量)的电子都不会是稳定的，因为总存在比它更低的状态. 为了克服这一困难，Dirac 利用 Pauli 不相容原理提出了电子海的概念. 他假定自然界中的物理真空态的所有负能级状态都被电子所填满，这种填满的情况没有任何物理效应而且能量为 0，不相容原理将阻止任何电子向负能级过渡. 当电子海中由于激发有一个电子从负能态跃迁到正能级 E_{1+} 时，这时系统的总能量是

$$E_{1+} - (-E_{2-}) = E_{1+} + E_{2-}$$

另一方面，根据假设负能级填满时应当没有任何电荷效应，而现在电子海中由于缺乏一个电子(负电荷)所以其净效应为 $-(-e) = +e$. 综合以上分析，这时从物理效应看等价于出现一个能量为 E_{1+}，电荷为 $-e$ 的电子及一个能量为 E_{2-}(仍为正能量!)，电荷为 $+e$ 的空穴的状态. 虽然 Dirac 的电子海的看法在量子理论中只能看做是一个合理的假定，但在以后的量子场论的理论框架下从理论上实现了这种空穴-正电子的构想，同时还去掉了不自然的电子海的假设. 所以可以说 Dirac 的电子海及空穴的思想是量子场论中的反粒子思想的萌芽.

2.3 包含电磁场的 Dirac 方程及其非相对论极限

2.3.1 包含电磁场的 Dirac 方程

首先要讨论如何将描述自由粒子的 Dirac 方程推广到包含有电磁场的情况. 在经典的电动力学中，当有电磁场时能量 E 改写成 $E + e\varphi$，机械动量 $\boldsymbol{p}$ 改写成正则动量 $\boldsymbol{p} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}$，$\varphi$ 与 $\boldsymbol{A}$ 分别是电磁场的标量势和矢量势. 在量子理论中，能量 E 由算符 $\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ 表征而动量 $\boldsymbol{p}$ 由算符 $-\mathrm{i}\hbar\nabla$ 表征. 因此将经典电动力学推广到对应的包

含电磁场的量子理论时便有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\varphi$$

$$-\mathrm{i}\hbar\nabla\to -\mathrm{i}\hbar\nabla+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}$$

将它们代入自由粒子的 Dirac 方程就得到包含电磁场时的 Dirac 方程

$$\left[\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\varphi\right)-c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)-mc^2\beta\right]\psi=0 \tag{2.3.1}$$

为了方便讨论这一方程的非相对论极限，将上面的方程再作用以

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\varphi\right)+c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)+mc^2\beta$$

得

$$\begin{aligned}&\left\{\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\varphi\right)^2-[\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A})]^2+\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A})\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\varphi\right)\right.\\&\left.-\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\varphi\right)\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A})-m^2c^2\right\}\psi=0\end{aligned} \tag{2.3.2}$$

下面将(2.3.2)式作进一步的化简并分别讨论其中的项.

(a) 利用公式

$$(\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{A}})(\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{B}})=(\hat{\boldsymbol{A}}\cdot\hat{\boldsymbol{B}})+\mathrm{i}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{B}} \tag{2.3.3}$$

可求出

$$\begin{aligned}&[\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A})]^2\\&=(c\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A})^2+\mathrm{i}\boldsymbol{\Sigma}\cdot[(c\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A})\times(c\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A})]\\&=(c\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A})^2+\mathrm{i}ec\boldsymbol{\Sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\times\hat{\boldsymbol{p}})\\&=(c\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A})^2+\mathrm{i}ec\boldsymbol{\Sigma}\cdot[-\mathrm{i}\hbar(\nabla\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\times\nabla)]\\&=(c\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A})^2+e\hbar c\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{B}\end{aligned} \tag{2.3.4}$$

在得到上式的推导过程中第二行到第三行利用了$\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{p}}=\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}=0$，最后一个等式应用了

$$\begin{aligned}&\mathrm{i}[\nabla\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\times\nabla]_x\psi\\&=[\partial_yA_z\psi-\partial_zA_y\psi+A_y\partial_z\psi-A_z\partial_y\psi]\mathrm{i}\\&=\mathrm{i}(\partial_yA_z-\partial_zA_y)\psi=\mathrm{i}B_x\psi\end{aligned}$$

以及相应的 y,z 方向的等式.

(b) $\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A})\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\varphi\right)-\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\varphi\right)\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A})$

$$=e\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\boldsymbol{A}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A}\right)+ec\boldsymbol{\alpha}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\varphi-\varphi\hat{\boldsymbol{p}})$$

$$=-\mathrm{i}e\hbar\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A}\right)-\mathrm{i}e\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla\varphi$$

$$=\mathrm{i}e\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{E} \tag{2.3.5}$$

最后一个等式利用了

$$\boldsymbol{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}-\nabla\varphi$$

把得到的(2.3.4)及(2.3.5)式代入(2.3.2)式中得

$$\left[\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\varphi\right)^2-(c\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A})^2-m^2c^4-e\hbar c\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}e\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{E}\right]\psi=0 \tag{2.3.6}$$

另一方面将自由粒子的 K-G 方程

$$\left[\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)^2-c^2\hat{\boldsymbol{p}}^2-m^2c^4\right]\psi=0$$

也按同样的原则推广到包含电磁场的情形,则有

$$\left[\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\varphi\right)^2-(c\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A})^2-m^2c^4\right]\psi=0 \tag{2.3.7}$$

将(2.3.6)式与(2.3.7)式作比较,便可以看出 Dirac 方程之所以多出了后面两项是因为它描述的粒子具有自旋的原故.

2.3.2 非相对论极限

为了更清楚地看清这一点,可对(2.4.6)式作非相对论极限下的近似.沿用前面的做法,将波函数 ψ 写成

$$\psi=\Phi\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}mc^2t}{\hbar}}$$

并仿照前面分别对(2.3.6)式中的各项进行讨论:

(a) $\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\varphi\right)^2\psi=\left\{\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\varphi\right)^2\Phi+2mc^2\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\varphi\right)\Phi+(mc^2+e\varphi)^2\Phi\right\}\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}mc^2t}{\hbar}}$

略去右方的二阶小量,得

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\varphi\right)^2\psi\cong\left[m^2c^4+2mc^2\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\varphi\right)\right]\Phi\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}mc^2t}{\hbar}} \tag{2.3.8}$$

(b) 将(2.3.6)式中的 $e\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{E}$ 与上式中的 $2mc^2e\varphi$ 作一个量级上的比较.

为此将粒子波函数分布的范围大小记作 R;粒子的(平均)速度记作 $\boldsymbol{v}$,可表示为

$$\boldsymbol{v}=c\boldsymbol{\alpha}$$

这个关系可以简单证明如下:海森堡图像中,算符 $\boldsymbol{v}$ 为

$$\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+\beta mc^2]$$

$$=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}c\boldsymbol{\alpha}[\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}]=c\boldsymbol{\alpha}$$

粒子的动量和范围有以下的测不准关系

$$(m\boldsymbol{v}) \cdot R \sim \hbar$$

另一方面由势和场强的关系有　$\varphi \sim RE$

有了这些量级上的关系后可得

$$\frac{e\hbar c\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{E}}{2mc^2 e\varphi} \sim \frac{\hbar v E}{2mc^2 RE} = \frac{v}{2c^2} \cdot \frac{\hbar}{mR} \sim \frac{v^2}{2c^2}$$

在非相对论近似下 $v^2/c^2 \ll 1$，所以 $e\hbar c\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{E}$ 比起 $2mc^2 e\varphi$ 来可以略去. 这样，考虑到(a)和(b)，则在非相对论极限的近似下方程变为

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - e\varphi + \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\Sigma} \cdot \boldsymbol{B}\right]\Phi \tag{2.3.9}$$

这样我们就得到了熟知的有电磁势时的非相对论性薛定谔方程，而且也得到非相对论量子力学中粒子由于具有自旋，因而有由于自旋产出的磁矩与外磁场的相互作用. 进一步地，这也印证了量子理论本来就包含粒子的自旋以及粒子的固有磁矩为 $\frac{eh}{2mc}\boldsymbol{\Sigma}$ 的结论。

2.4　Dirac 自由电子的 Zitterbewegung

2.4.1　问题的提出

前面已讨论过，自由电子的相对论 Dirac 方程为

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} + \beta mc^2 \tag{2.4.1}$$

自由电子沿某一方向，例如 x_1 方向的速度算符是 $\dot{x}_1$. 用海森堡的图像讨论，任何力学量对时间的导数由下式决定

$$\dot{\hat{o}} = \frac{[\hat{o}, H]}{\mathrm{i}\hbar} \tag{2.4.2}$$

将上式应用于 x_1 有

$$\dot{x}_1 = \frac{[x_1, H]}{\mathrm{i}\hbar} = c\alpha_1 \tag{2.4.3}$$

于是会有如下的问题：由于 α_1 的本征值为 ± 1. 所以在粒子处于 α_1 的本征态时，$\dot{x}_1$ 的期待值应当是 $\pm c$. 即便状态不是处于 α_1 的本征态，而是两种本征态的组合. 电子的速度期待值也应当是 c 量级的极大的速度. 但为什么实际的自由电子的观测速度可以是大大低于光速的普通速度呢？此外，前面讨论过自由电子的动量 p 一定的平面波解，那里动量 p 可以取任何低于 c 的值. 可见 p 与 $\dot{x}_1$ 之间也不会有对应的经典相对论性的关系. 对于这样一个表面看来的疑难问题，Dirac 作了如下的解答.

2.4.2 Dirac 的解答与 Zitterbewegung

为了回答上面的问题,必须求出 α_1 算符随时间 t 的变化. Dirac 在他的《量子力学原理》一书中是这样来计算 α_1 算符随 t 的变化的:作 $i\hbar\alpha_1$ 的时间导数

$$i\hbar\dot{\alpha}_1 = [\alpha_1, H] = \alpha_1 H - H\alpha_1 \\ = 2\alpha_1 H - (\alpha_1 H + H\alpha_1)$$

上式中右方的第二项是 α_1 与 H 的反对易关系. 代入(2.4.1)式中的 H,有

$$\alpha_1 H + H\alpha_1 = \alpha_1(c\alpha_1 p_1) + (c\alpha_1 p_1)\alpha_1 = 2cp_1$$

因此得

$$i\hbar\dot{\alpha}_1 = 2\alpha_1 H - 2cp_1 = -2H\alpha_1 + 2cp_1 \tag{2.4.4}$$

由于 H 和 p_1 都是守恒量,故它们对 t 求导为零. 因此从(2.4.4)式的第一个等式的两端求导得

$$i\hbar\ddot{\alpha}_1 = 2\dot{\alpha}_1 H \tag{2.4.5}$$

积分后得

$$\dot{\alpha}_1 = \dot{\alpha}_1^0 e^{\frac{-2iHt}{\hbar}} \tag{2.4.6}$$

上式中 $\dot{\alpha}_1^0$ 是 $t=0$ 时 $\dot{\alpha}_1$ 的初始值. 这里要提请注意的是 $\dot{\alpha}_1^0$ 及 H 都是算符,因此要保持它们的顺序. 现在回到(2.4.4)式,将其改写成

$$\alpha_1 = \frac{1}{2}(i\hbar\dot{\alpha}_1 H^{-1} + 2cpH^{-1})$$

再把(2.4.6)式代入上式便得到

$$\alpha_1 = \frac{1}{2}i\hbar\dot{\alpha}_1^0 e^{\frac{-2iHt}{\hbar}} H^{-1} + cpH^{-1} \tag{2.4.7}$$

将上式代回(2.4.3)式得

$$\dot{x}_1 = \frac{1}{2}i\hbar c\dot{\alpha}_1^0 e^{\frac{-2iHt}{\hbar}} H^{-1} + c^2 p_1 H^{-1}$$

将上式积分,最后得到

$$x_1 = -\frac{1}{4}c\hbar^2 c\dot{\alpha}_1^0 e^{\frac{-2iHt}{\hbar}} H^{-2} + c^2 p_1 H^{-1} t + a \tag{2.4.8}$$

至此,从相对论自由电子满足的 Dirac 方程出发导出了自由电子运动的坐标算符随 t 变化的公式. 从(2.4.8)式我们可以得出下面的结论,并可回答 2.4.1 节中提出的问题.

(a) (2.4.8)式右方的第二项告诉我们,粒子坐标随 t 变化的这一部分是按恒定的速率 pH^{-1} 随 t 增加的. 如果(2.4.8)式右方的第一项不存在. 那么粒子的坐标(或速度)与动量 p 的关系确有经典的相对论关系. 但因为有了第一项,这种关系不再成立.

(b) (2.4.8)式第一项是一个粒子在作振荡对 x_1 的贡献. 这也就是说,尽管粒子的瞬时速度是 c 的量级,但观测速度却是一段时间间隔中瞬时速度的平均值. 在第一项迅速振荡的情形下,虽然恒定的第二项和第一项的总和使粒子的瞬时速度是 c 的量级,但其观测值在一段时间间隔中作平均时会将第一项的振动贡献平均掉,净的观测速度值只有来自第二项的贡献. 相对论自由电子运动时这种振动的存在会自然、合理地解释上一小节中提出的疑问. 这种振动就是所谓的相对论粒子的 Zitterbewegung.

(c) 由以上的讨论知(2.4.8)式中的 a 并不直接就是粒子在 $t=0$ 时的位置. a 和第一项在 $t=0$ 时的值之和才是粒子的初始位置.

2.4.3　Dirac 方程的玻色算符表示

虽然自由电子的运动有 Zitterbewegung 的现象,但直接用实验证实其存在是很困难的,原因是这种振动的频率极高,振幅又小. 不过,人们虽然不能对自由电子的 Zitterbewegung 作直接的观测,但能利用阱中囚禁的离子来模拟它,因为阱中的离子在恰当条件下服从的运动方程的形式和自由电子的 Dirac 方程一样. 观测阱中离子的 Zitterbewegung 可以可操控的方式进行. 这样一来,就需要把上面的讨论继续进行下去. (2.4.8)式还只是原则上肯定 Dirac 粒子的运动含有平动及振动两部分,但还需要同时知道粒子的态矢,才能定量地求出 $\bar{x}(t)$来. 在不同的初始状态下,振动有些什么细节上的不同等都需要把粒子的运动完全解出后才方便讨论. 为此,我们首先要做的是将 Dirac 方程用玻色算符来表示. 下面将会清楚看到这样做的好处.

从求 Dirac 方程的平面波解的过程中,我们已看到,自由粒子自旋态向上、向下的投影之间是相互独立的. 换句话说,它们满足的方程是脱耦的. 因此,为了下面讨论的简便起见,我们的讨论就限定在一定的自旋投影态上. 为此可将四行四列的 Dirac 方程简化为二行二列的形式,其次把粒子运动的方向取为 x_1 的方向,这样可把 Dirac 方程表示为

$$\begin{aligned} H &= c\alpha_1 \hat{p} + mc^2\beta \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} c\hat{p} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} mc^2 \end{aligned} \tag{2.4.9}$$

引入玻色算符

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \frac{\Delta}{\sqrt{2}}(a+a^+) \\ \hat{p} &= \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}\Delta}(a-a^+) \end{aligned} \tag{2.4.10}$$

将(2.4.10)式代入(2.4.9)式,H 改写成

$$H=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\frac{\mathrm{i}c}{\sqrt{2}\Delta}(a^{+}-a)+\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}mc^{2} \tag{2.4.11}$$

为书写简便,记

$$A\equiv\frac{c}{\sqrt{2}\Delta} \tag{2.4.12}$$

则有

$$H=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\mathrm{i}A(a^{+}-a)+\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}mpc^{2} \tag{2.4.13}$$

2.4.4 宇称与宇称-能量共同本征态

首先要指出的是,自由粒子的哈密顿量和宇称算符 $\hat{\Pi}$ 是对易的. 换句话说,宇称是守恒量,即

$$[\hat{\Pi},H]=0 \tag{2.4.14}$$

其中 $\hat{\Pi}$ 定义为

$$\hat{\Pi}=\exp\left[\mathrm{i}\pi\left(\frac{\beta}{2}+\frac{1}{2}\right)+a^{+}a\right] \tag{2.4.15}$$

为简便,(2.4.14)式的证明仍用 H 的二行二列形式. 回到原始的四行四列形式证明过程几乎完全一样. 为下面的证明作准备,先看一下 $\frac{\beta}{2}+\frac{1}{2}$ 的矩阵形式

$$\frac{\beta}{2}+\frac{1}{2}=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix} \tag{2.4.16}$$

(2.4.14)式的证明等价于计算下式

$$\begin{aligned}\hat{\Pi}H\hat{\Pi}^{-1}&=\hat{\Pi}(\mathrm{i}A\alpha_{1}(a^{+}-a)+mc^{2}\beta)\hat{\Pi}^{-1}\\&=\hat{\Pi}(\mathrm{i}A\alpha_{1}(a^{+}-a))\hat{\Pi}^{-1}+\hat{\Pi}(mc^{2}\beta)\hat{\Pi}^{-1}\end{aligned} \tag{2.4.17}$$

(a) $\hat{\Pi}(mc^{2}\beta)\hat{\Pi}^{-1}$

$$\begin{aligned}&=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi\left(\frac{\beta}{2}+\frac{1}{2}+a^{+}a\right)}(mc^{2}\beta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi\left(\frac{\beta}{2}+\frac{1}{2}+a^{+}a\right)}\\&=mc^{2}\beta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi\left(\frac{\beta}{2}+\frac{1}{2}+a^{+}a\right)}\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi\left(\frac{\beta}{2}+\frac{1}{2}+a^{+}a\right)}\\&=mc^{2}\beta\end{aligned} \tag{2.4.18}$$

最后一个等式的得来源自 β 与 $\hat{\Pi}$ 中的所有算符都对易.

(b) $\hat{\Pi}(\mathrm{i}A\alpha_{1}(a^{+}-a))\hat{\Pi}^{-1}$

$$\begin{aligned}&=\mathrm{i}A\hat{\Pi}\alpha_{1}\hat{\Pi}^{-1}\hat{\Pi}(a^{+}-a)\hat{\Pi}^{-1}\\&=\mathrm{i}A\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi\left(\frac{\beta}{2}+\frac{1}{2}\right)}\alpha_{1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi\left(\frac{\beta}{2}+\frac{1}{2}\right)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi(a^{+}a)}(a^{+}-a)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi(a^{+}a)}\end{aligned}$$

这里最后一个等式的得来是因为只需保留 $\hat{\Pi}$ 中与 α_1 或(a^+-a)的不对易的部分.

(c) $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi\left(\frac{\beta}{2}+\frac{1}{2}\right)}\alpha_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi\left(\frac{\beta}{2}+\frac{1}{2}\right)}$

$$=\alpha_1+\mathrm{i}\pi\left[\frac{\beta}{2}+\frac{1}{2},\alpha_1\right]+\frac{1}{2!}(\mathrm{i}\pi)^2\left[\frac{\beta}{2}+\frac{1}{2},\left[\frac{\beta}{2}+\frac{1}{2},\alpha_1\right]\right]+\cdots$$

$$=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}+\mathrm{i}\pi\left[\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\right]+\frac{1}{2!}(\mathrm{i}\pi)^2\left[\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix},\left[\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\right]\right]+\cdots$$

$$=\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}+\mathrm{i}\pi\left[\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}\right]+\mathrm{i}\pi\left[\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}\right]+$$

$$+\frac{1}{2!}(\mathrm{i}\pi)^2\left[\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix},\left[\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}\right]\right]$$

$$+\frac{1}{2!}(\mathrm{i}\pi)^2\left[\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix},\left[\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}\right]\right]+\cdots$$

$$=\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}+\mathrm{i}\pi\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}-\mathrm{i}\pi\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}+\frac{1}{2!}(\mathrm{i}\pi)^2\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}$$

$$+\frac{1}{2!}(-\mathrm{i}\pi)^2\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}+\cdots$$

$$=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi}\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi}\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}=-\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}$$

$$=-\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}=-\alpha_1 \tag{2.4.19}$$

(d) $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a^+a}(a^+-a)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi(a^+a)}$

$$=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a^+a}a^+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi a^+a}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a^+a}a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi a^+a}$$

$$=a^++\mathrm{i}\pi[a^+a,a^+]+\frac{1}{2!}(\mathrm{i}\pi)^2[a^+a,[a^+a,ea^+]]+\cdots$$

$$-(a+\mathrm{i}\pi[a^+a,a]+\frac{1}{2!}(\mathrm{i}\pi)^2[a^+a,[a^+a,a]]+\cdots)$$

$$=a^++\mathrm{i}\pi a^++\frac{1}{2!}(\mathrm{i}\pi)^2a^++\cdots$$

$$-(a-\mathrm{i}\pi a+\frac{1}{2!}(\mathrm{i}\pi)^2a-\cdots)$$

$$=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi}a^+-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi}a=-(a^+-a) \tag{2.4.20}$$

将(2.4.18),(2.4.19)及(2.4.20)式代入(2.4.17)式得

$$\hat{\Pi}H\hat{\Pi}^{-1}=\mathrm{i}A(-\alpha_1)(a-a^+)+mc^2\beta=H$$

即 $\hat{\Pi}H=H\hat{\Pi}$,(2.4.14)式得证.

在证明了 Dirac 自由粒子具有守恒量宇称之后,人们自然会想到能否求出宇

称与能量的共同本征态. 前面求出的平面波解实际上是动量和能量的共同本征态. 下面我们会看到,求解宇称和能量共同本征态的意义不单是找到另一种共同本征态,它也是讨论 Zitterbewegung 的必要准备. 可以证明 Dirac 自由粒子的宇称和能量的共同本征态一定取如下的形式

$$|\rangle = \begin{pmatrix} |\Psi_1\rangle \\ |\Psi_2\rangle \end{pmatrix} \tag{2.4.21}$$

其中

$$|\Psi_1\rangle = F_1\left(e^{\frac{1}{2}a^+a^+ + \alpha a^+} \mp e^{\frac{1}{2}a^+a - \alpha a^+}\right)|0\rangle \tag{2.4.22}$$

$$|\Psi_2\rangle = F_2\left(e^{\frac{1}{2}a^+a^+ + \alpha a^+} \pm e^{\frac{1}{2}a^+a - \alpha a^+}\right)|0\rangle \tag{2.4.23}$$

(2.4.22)和(2.4.23)两式中的加减号上面对应于宇称本征值 $\Pi=+1$ 的情形,下面的对应于 $\Pi=-1$ 的情形.

(a) 宇称本征态.

考察(2.4.22)和(2.4.23)式中的 $\left(e^{\frac{1}{2}a^+a^+ + \alpha a^+} \pm e^{\frac{1}{2}a^+a - \alpha a^+}\right)|0\rangle$. 由 $\left(e^{\frac{1}{2}a^+a^+ + \alpha a^+} \pm e^{\frac{1}{2}a^+a - \alpha a^+}\right)|0\rangle = e^{\frac{1}{2}a^+a^+}\left(e^{\alpha a^+} \pm e^{-\alpha a^+}\right)|0\rangle$ 看出,当将指数上的算符展开下来后 $e^{\alpha a^+a^+}$ 只贡献偶数的粒子数态,而 $e^{\alpha a^+} \pm e^{-\alpha a^+}$ 分别贡献偶数及奇数的粒子数态. 因此有

$$\left(e^{\frac{1}{2}a^+a^+ + \alpha a^+} \pm e^{\frac{1}{2}a^+a - \alpha a^+}\right)|0\rangle = \begin{cases} \sum_n f_n\,|2n\rangle & \text{只含偶数粒子数态} \\ \sum_n \varphi_n\,|2n+1\rangle & \text{只含奇数粒子数态} \end{cases}$$

当我们用宇称算符 $\hat{\Pi}$ 作用到(2.4.21)式的态矢上时,可得

$$\begin{aligned}
\hat{\Pi}\,|\rangle &= e^{i\pi\left(\frac{\beta}{2}+\frac{1}{2}+a^+a\right)}\begin{pmatrix} |\Psi_1\rangle \\ |\Psi_2\rangle \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} e^{i\pi(a^+a+1)}\,|\Psi_1\rangle \\ e^{i\pi(a^+a)}\,|\Psi_2\rangle \end{pmatrix} \\
&= \begin{cases} \begin{pmatrix} e^{i\pi(a^+a+1)} \sum \varphi_n\,|2n+1\rangle \\ e^{i\pi(a^+a)} \sum f_n\,|2n\rangle \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} e^{i\pi(a^+a+1)} \sum f_n\,|2n\rangle \\ e^{i\pi(a^+a)} \sum_n \varphi_n\,|2n+1\rangle \end{pmatrix} \end{cases} = \begin{cases} \begin{pmatrix} \sum_n e^{i\pi(2n+2)}\varphi_n\,|2n+1\rangle \\ \sum_n e^{i\pi(2n)} f_n\,|2n\rangle \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} \sum_n e^{i\pi(2n+1)} f_n\,|2n\rangle \\ \sum_n e^{i\pi(2n+1)}\varphi_n\,|2n+1\rangle \end{pmatrix} \end{cases}
\end{aligned}$$

$$
=\begin{cases}\begin{pmatrix}\sum\limits_n \varphi_n \mid 2n+1\rangle \\ \sum\limits_n f_n \mid 2n\rangle\end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix}\sum\limits_n -f_n \mid 2n\rangle \\ \sum\limits_n -\varphi_n \mid 2n+1\rangle\end{pmatrix}\end{cases}=\begin{cases}\begin{pmatrix}\mid \Psi_1\rangle \\ \mid \Psi_2\rangle\end{pmatrix} \\ -\begin{pmatrix}\mid \Psi_1\rangle \\ \mid \Psi_2\rangle\end{pmatrix}\end{cases} \tag{2.4.24}
$$

这样就证明了(2.4.21),(2.4.22),(2.4.23)式的确是宇称 $\hat{\Pi}$ 的、对应本征值 $\Pi=\pm 1$ 的本征态.

(b) 为了证明(2.4.21),(2.4.22),(2.4.23)式也是能量的本征态,将它们代入定态方程

$$
\begin{aligned}
H\mid\rangle &= \left[\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\mathrm{i}A(a^+-a)+\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}mc^2\right]\begin{pmatrix}\mid \Psi_1\rangle \\ \mid \Psi_2\rangle\end{pmatrix} \\
&= E\begin{pmatrix}\mid \Psi_1\rangle \\ \mid \Psi_2\rangle\end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{2.4.25}
$$

将上式按上、下分量写出

$$
\mathrm{i}A(a^+-a)\mid \Psi_2\rangle + mc^2 \mid \Psi_1\rangle = E\mid \Psi_1\rangle \tag{2.4.26}
$$

$$
\mathrm{i}A(a^+-a)\mid \Psi_1\rangle + mc^2 \mid \Psi_2\rangle = E\mid \Psi_2\rangle \tag{2.4.27}
$$

先讨论 $\Pi=+1$ 的情形. 将(2.4.22)和(2.4.23)式取上指标的表示式代入(2.4.26)及(2.4.27)式,得

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{i}A(a^+-a)F_2(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^++\alpha a^+}+\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+-\alpha a^+})\mid 0\rangle + mc^2F_1(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^++\alpha a^+}-\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+-\alpha a^+})\mid 0\rangle \\
&= EF_1(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^++\alpha a^+}-\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+-\alpha a^+})\mid 0\rangle \\
&\mathrm{i}A(a^+-a)F_1(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^++\alpha a^+}-\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+-\alpha a^+})\mid 0\rangle + mc^2F_2(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^++\alpha a^+}+\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+-\alpha a^+})\mid 0\rangle \\
&= EF_2(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^++\alpha a^+}+\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+-\alpha a^+})\mid 0\rangle
\end{aligned}
$$

即

$$
\begin{aligned}
&-\mathrm{i}A\alpha F_2(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^++\alpha a^+}-\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+-\alpha a^+})\mid 0\rangle + mc^2F_1(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^++\alpha a^+}-\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+-\alpha a^+})\mid 0\rangle \\
&= EF_1(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^++\alpha a^+}-\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+-\alpha a^+})\mid 0\rangle \\
&-\mathrm{i}A\alpha F_1(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^++\alpha a^+}+\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+-\alpha a^+})\mid 0\rangle - mc^2F_2(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^++\alpha a^+}+\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+-\alpha a^+})\mid 0\rangle \\
&= EF_2(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^++\alpha a^+}+\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+-\alpha a^+})\mid 0\rangle
\end{aligned}
$$

最后得

$$
-\mathrm{i}A\alpha F_2 + mc^2F_1 = EF_1
$$

$$
-\mathrm{i}A\alpha F_1 - mc^2F_2 = EF_2
$$

联立方程组有解的条件为

$$\begin{vmatrix} mc^2 - E & -\mathrm{i}A\alpha \\ -\mathrm{i}A\alpha & -E - mc^2 \end{vmatrix} = (E^2 - m^2c^4) + A^2\alpha^2 = 0$$

即得

$$E = \pm\sqrt{m^2c^4 - A^2\alpha^2} \tag{2.4.28}$$

和原来已知的质能关系比较，可知 α 必须是一纯虚数 $\alpha = \mathrm{i}\beta$. 于是有

$$E = \pm\sqrt{m^2c^4 + A^2\beta^2} \tag{2.4.29}$$

$$\frac{E_2}{F_1} = \frac{E - mc^2}{A\beta} = \frac{A\beta}{E + mc^2} \tag{2.4.30}$$

由于对应于同一个 β，有 E_+，E_- 两种解，而且现在还没有对态矢进行归一，所以我们约定：对 E_+ 的态矢，$F_1 = 1$，$F_2 = \frac{A\beta}{E_+ + mc^2}$；对 E_- 的态矢，$F_2 = 1$，$F_1 = \frac{A\beta}{E_- - mc^2}$. 这样约定后，可将解重新表示为

$\Pi = +1$：

E_+：

$$|\Psi_1^{(+,+)}(\beta)\rangle = (\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+ + \mathrm{i}\beta a^+} - \mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+ - \mathrm{i}\beta a^+})|0\rangle \tag{2.4.31}$$

$$|\Psi_2^{(+,+)}(\beta)\rangle = \frac{A\beta}{E_+ + mc^2}(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+ + \mathrm{i}\beta a^+} + e^{\frac{1}{2}a^+a^+ - \mathrm{i}\beta a^+})|0\rangle \tag{2.4.32}$$

E_-：

$$|\Psi_1^{(+,-)}(\beta)\rangle = \frac{+A\beta}{E_-(\beta) - mc^2}(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+ + \mathrm{i}\beta a^+} - \mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+ - \mathrm{i}\beta a^+})|0\rangle \tag{2.4.33}$$

$$|\Psi_2^{(+,-)}(\beta)\rangle = (\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+ + \mathrm{i}\beta a^+} + \mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+ - \mathrm{i}\beta a^+})|0\rangle \tag{2.4.34}$$

以上四式中的(+，+)，(+，−)表示宇称和能量分别取正、负的情形. 对于 $\Pi = -1$ 的情形，可以类似地推导，得出和(2.4.28)，(2.4.29)及(2.4.30)式一样的结果. 按上面的约定可表示为

$\Pi = -1$：

E_+：

$$|\Psi_1^{(-,+)}(\beta)\rangle = (\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+ + \mathrm{i}\beta a^+} + \mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+ - \mathrm{i}\beta a^+})|0\rangle \tag{2.4.35}$$

$$|\Psi_2^{(-,+)}(\beta)\rangle = \frac{A\beta}{E_+ + mc^2}(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+ + \mathrm{i}\beta a^+} - \mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+ - \mathrm{i}\beta a^+})|0\rangle \tag{2.4.36}$$

E_-：

$$|\Psi_1^{(-,-)}(\beta)\rangle = \frac{+A\beta}{E_-(\beta) - mc^2}(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+ + \mathrm{i}\beta a^+} + \mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+ - \mathrm{i}\beta a^+})|0\rangle \tag{2.4.37}$$

$$|\Psi_2^{(-,-)}(\beta)\rangle = (\mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+ + \mathrm{i}\beta a^+} - \mathrm{e}^{\frac{1}{2}a^+a^+ - \mathrm{i}\beta a^+})|0\rangle \tag{2.4.38}$$

2.4.5 Zitterbewegung 的讨论

为了使 Dirac 粒子的位置或速度期待值取有限的确定值，必须用波包形式的态矢. 为了计算简便起见，选择如下的波包，即初始态为

$$|t=0\rangle=\int e^{-\delta\beta^2}[|\Psi^{(+,+)}\rangle+|\Psi^{(+,-)}\rangle+|\Psi^{(-,+)}\rangle+|\Psi^{(-,-)}\rangle]d\beta \tag{2.4.39}$$

的形式.

(a) 先计算$\langle t=0|t=0\rangle$

$$\begin{aligned}&\langle t=0\mid t=0\rangle\\&=\int e^{-\delta(\beta^2+\beta'^2)}d\beta d\beta'\cdot[\langle\Psi^{(+,+)}(\beta)|+\langle\Psi^{(+,-)}(\beta)|+\langle\Psi^{(-,+)}(\beta)|+\langle\Psi^{(-,-)}(\beta)|]\\&\quad\cdot[|\Psi^{(+,+)}(\beta')\rangle+|\Psi^{(+,-)}(\beta')\rangle+|\Psi^{(-,+)}(\beta')\rangle+|\Psi^{(-,-)}(\beta')\rangle]\\&=\int e^{-\delta(\beta^2+\beta'^2)}d\beta d\beta'[\langle\Psi^{(+,+)}(\beta)\mid\Psi^{(+,+)}(\beta')\rangle+\langle\Psi^{(+,-)}(\beta)\mid\Psi^{(+,-)}(\beta')\rangle\\&\quad+\langle\Psi^{(-,+)}(\beta)\mid\Psi^{(-,+)}(\beta')\rangle+\langle\Psi^{(-,-)}(\beta)\mid\Psi^{(-,-)}(\beta')\rangle]\end{aligned} \tag{2.4.40}$$

最后等式的得到应用了不同宇称及不同能量的本征态相互正交的性质. 将(2.4.40)式详细写出为

$$\begin{aligned}&\langle t=0\mid t=0\rangle\\&=\int e^{-\delta(\beta^2+\beta'^2)}d\beta d\beta'[\langle\Psi_1^{(++)}\mid\Psi_1^{(++)}\rangle+\langle\Psi_2^{(++)}\mid\Psi_2^{(++)}\rangle+\langle\Psi_1^{(+-)}\mid\Psi_1^{(+-)}\rangle\\&\quad+\langle\Psi_2^{(+-)}\mid\langle\Psi_2^{(+-)}\rangle+\langle\Psi_1^{(-+)}\mid\Psi_1^{(-+)}\rangle+\langle\Psi_2^{(-+)}\mid\Psi_2^{(-+)}\rangle+\langle\Psi_1^{(--)}\mid\Psi_1^{(--)}\rangle\\&\quad+\langle\Psi_2^{(--)}\mid\Psi_2^{(--)}\rangle]\\&=\int e^{-\delta(\beta^2+\beta'^2)}d\beta d\beta'[\langle 0\mid(e^{\frac{1}{2}aa-i\beta a}-e^{\frac{1}{2}aa+i\beta a})(e^{\frac{1}{2}a^+a^++i\beta'a^+}-e^{\frac{1}{2}a^+a^+-i\beta'a^+})|0\rangle\\&\quad+\frac{A\beta}{E_+(\beta)+mc^2}\frac{A\beta'}{E_+(\beta')+mc^2}\langle 0\mid(e^{\frac{1}{2}aa-i\beta a}+e^{\frac{1}{2}aa+i\beta a})(e^{\frac{1}{2}a^+a^++i\beta'a^+}\\&\quad+e^{\frac{1}{2}a^+a^+-i\beta'a^+})|0\rangle+\frac{A\beta}{E_-(\beta)-mc^2}\frac{A\beta'}{E_-(\beta')+mc^2}\langle 0\mid(e^{\frac{1}{2}aa-i\beta a^+}-e^{\frac{1}{2}aa+i\beta a})\\&\quad(e^{\frac{1}{2}a^+a^++i\beta'a^+}-e^{\frac{1}{2}a^+a^+-i\beta'a^+})|0\rangle+\langle 0\mid(e^{\frac{1}{2}aa-i\beta a}+e^{\frac{1}{2}aa+i\beta a})(e^{\frac{1}{2}a^+a^++i\beta'a^+}\\&\quad+e^{\frac{1}{2}a^+a^+-i\beta'a^+})|0\rangle+\langle 0\mid(e^{\frac{1}{2}aa-i\beta a}+e^{\frac{1}{2}aa+i\beta a})(e^{\frac{1}{2}a^+a^++i\beta'a}+e^{\frac{1}{2}a^+a^+-i\beta'a^+})|0\rangle\\&\quad+\frac{A\beta}{E_+(\beta)+mc^2}\frac{A\beta'}{E_+(\beta')+mc^2}\langle 0\mid(e^{\frac{1}{2}aa-i\beta a}-e^{\frac{1}{2}aa+i\beta a})(e^{\frac{1}{2}a^+a^++i\beta'a^+}\\&\quad-e^{\frac{1}{2}a^+a^+-i\beta'a^+})|0\rangle+\frac{A\beta}{E_-(\beta)-mc^2}\frac{A\beta'}{E_-(\beta')-mc^2}\langle 0\mid(e^{\frac{1}{2}aa-i\beta a}+e^{\frac{1}{2}aa+i\beta a})\\&\quad(e^{\frac{1}{2}a^+a^++i\beta'a^+}+e^{\frac{1}{2}a^+a^+-i\beta'a^+})|0\rangle\langle 0\mid(e^{\frac{1}{2}aa-i\beta a}-e^{\frac{1}{2}aa+i\beta a})(e^{\frac{1}{2}a^+a^++i\beta'a^+}\\&\quad-e^{\frac{1}{2}a^+a^+-i\beta'a^+})|0\rangle\end{aligned}$$

$$= 2\int e^{-\delta(\beta^2+\beta'^2)} d\beta d\beta' [\langle 0 \mid (e^{\frac{1}{2}aa-i\beta a} - e^{\frac{1}{2}aa+i\beta a})(e^{\frac{1}{2}a^+a^++i\beta' a^+} - e^{\frac{1}{2}a^+a^+-i\beta' a^+}) \mid 0\rangle$$

$$+ \langle 0 \mid (e^{\frac{1}{2}aa-i\beta a} + e^{\frac{1}{2}aa+i\beta a})(e^{\frac{1}{2}a^+a^++i\beta' a^+} + e^{\frac{1}{2}a^+a^+-i\beta' a^+}) \mid 0\rangle]$$

$$\left[1 + \frac{A^2\beta\beta'}{(E_+(\beta)+mc^2)^2(E_+(\beta')+mc^2)}\right] \tag{2.4.41}$$

得到上式的最后一个等式用到

$$\frac{AB}{E_-(\beta)-mc^2}\frac{AB'}{E_-(\beta')-mc^2} = \frac{AB}{-E_+(\beta)-mc^2}\frac{AB'}{-E_+(\beta')-mc^2}$$

$$= \frac{AB}{E_+(\beta)+mc^2}\frac{AB'}{E_+(\beta')+mc^2}$$

计算

$$\langle 0 \mid (e^{\frac{1}{2}aa-i\beta a} - e^{\frac{1}{2}aa+i\beta a})(e^{\frac{1}{2}a^+a^++i\beta' a^+} - e^{\frac{1}{2}a^+a^+-i\beta' a^+}) \mid 0\rangle$$

$$= \langle 0 \mid e^{\frac{1}{2}aa}(e^{-i\beta a} - e^{i\beta a})(e^{i\beta' a^+} - e^{-i\beta' a^+}) e^{\frac{1}{2}a^+a^+} \mid 0\rangle$$

$$= \langle 0 \mid \sum_m \frac{1}{m!}\left(\frac{1}{2}aa\right)^m \left(\sum_n \frac{2}{(2n+1)!}(-i\beta a)^{2n+1}\right)$$

$$\left(\sum_{n_1} \frac{2}{(2n_1+1)!}(i\beta' a^+)^{2n+1} \sum_{m_1} \frac{1}{m_1!}\left(\frac{1}{2}a^+ a^+\right)^{m_1}\right) \mid 0\rangle$$

$$= \langle 0 \mid \sum_{mn} \frac{2(-1)^n \cdot (-i)(\beta)^{2n+1}(a)^{2(m+n)+1}}{2^m m!(2n+1)!} \cdot \sum_{m_1n_1} \frac{2(-1)^{n_1} i(\beta')^{2n+1}(a^+)^{2(m_1+n_1)+1}}{2^{m_1} m_1!(2n+1)!} \mid 0\rangle$$

$$= 4\langle 0 \mid \sum_{mn} \frac{-(-1)^n i(\beta)^{2n+1}(a)^{2(m+n)+1}}{2^m m!(2n+1)!} \sum_{m_1n_1} \frac{(-1)^{n_1} i(\beta')^{2n_1+1}(a^+)^{2(m_1+n_1)+1}}{2^{m_1} m_1!(2n_1+1)!} \mid 0\rangle$$

$$= 4\sum_{mn} \langle 2(m+n)+1 \mid \frac{-(-1)^n i(\beta)^{2n+1}\sqrt{(2(m+n)+1)!}}{2^m m!(2n+1)!}$$

$$\sum_{m_1n_1} \frac{(-1)^{n_1} i(\beta')^{2n_1+1}\sqrt{(2m_1+2n_1+1)!}}{2^{m_1} m_1!(2n_1+1)!} \mid 2m_1+2n_1+1\rangle$$

$$= 4\sum_{mnm_1} \frac{(-1)^{m+2n-m_1}(\beta)^{2n+1}(\beta')^{2(m+n-m_1)+1}(2m+2n+1)!}{2^m m!2^{m_1} m_1!(2n+1)!(2m+2n-2m_1+1)!} \tag{2.4.42}$$

$$\langle 0 \mid (e^{\frac{1}{2}aa-i\beta a} + e^{\frac{1}{2}aa+i\beta a})(e^{\frac{1}{2}a^+a^++i\beta' a^+} + e^{\frac{1}{2}a^+a^+-i\beta' a^+}) \mid 0\rangle$$

$$= \langle 0 \mid \sum_{mn} \frac{1}{m!}\left(\frac{1}{2}aa\right)^m \frac{2}{(2n)!}(-i\beta a)^{2n} \cdot \sum_{m_1n_1} \frac{1}{m_1!}\left(\frac{1}{2}a^+ a^+\right)^{m_1} \frac{2}{(2n_1)!}(i\beta' a^+)^{2n_1} \mid 0\rangle$$

$$= \sum_{mn} \langle 2m+2n \mid \frac{2(-1)^n(\beta)^{2n}\sqrt{(2m+2n)!}}{2^m m!(2n)!} \frac{2(-1)^{n_1}(\beta')^{2n_1}\sqrt{(2m_1+2n_1)!}}{2^{m_1} m_1!(2n_1)!}$$

$$\mid 2m_1+2n_1\rangle$$

$$= \sum_{mnm_1} 4\frac{(-1)^{m+2n-m_1}(\beta)^{2n}(\beta')^{2(m+n-m_1)}(2m+2n)!}{2^m m!2^{m_1} m_1!(2n)!(2m+2n-2m_1)!} \tag{2.4.43}$$

将(2.4.42)及(2.4.43)式代入(2.4.41)式得

$$
\begin{aligned}
&\langle t=0 \mid t=0\rangle \\
&=\delta\int \mathrm{e}^{-\delta(\beta^2+\beta'^2)}\left[1+\frac{A^2\beta\beta'}{(E_+(\beta)+mc^2)(E_+(\beta')+mc^2)}\right]\mathrm{d}\beta\mathrm{d}\beta' \\
&\quad\cdot\sum_{mnm_1}\frac{(-1)^{m+2n-m_1}}{2^m m!2_1^m m_1!}\left[\frac{\beta^{2n+1}\beta'^{2(m+n-m_1)+1}(2m+2n+1)!}{(2n+1)!(2m+2n-2m_1+1)!}\right. \\
&\quad\left.+\frac{\beta^{2n}\beta'^{2(m+n-m_1)}(2m+2n)!}{2n!(2m+2n-2m_1)!}\right]
\end{aligned}
\tag{2.4.44}
$$

(b) 由(2.4.41)式可知，t 时刻系统的态矢为

$$
\begin{aligned}
\mid t\rangle &=\int \mathrm{e}^{-\delta\beta^2}[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_+(\beta)t}(\mid \Psi^{(+,+)}(\beta)\rangle+\mid \Psi^{(-+)}(\beta)\rangle) \\
&\quad+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_-(\beta)t}(\mid \Psi^{(+-)}(\beta)\rangle+\mid \Psi^{(--)}(\beta)\rangle]\mathrm{d}\beta \\
&=\int \mathrm{e}^{-\delta\beta^2}[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_+(\beta)t}(\mid \Psi^{(++)}(\beta)\rangle+\mid \Psi^{(-+)}(\beta)\rangle) \\
&\quad+\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_+(\beta)t}(\mid \Psi^{(+-)}(\beta)\rangle+\mid \Psi^{(--)}(\beta)\rangle]\mathrm{d}\beta
\end{aligned}
\tag{2.4.45}
$$

(c) 计算

$$
\begin{aligned}
\bar{x}(t)&=\langle t \mid \frac{\Delta}{\sqrt{2}}(a+a^+) \mid t\rangle \\
&=\frac{\Delta}{\sqrt{2}}\int \mathrm{e}^{-\delta(\beta^2+\beta'^2)}\mathrm{d}\beta\mathrm{d}\beta'\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_+(\beta)-E_+(\beta'))t}[(\langle\Psi^{(++)}(\beta)\mid+\langle\Psi^{(-+)}(\beta)\mid) \\
&\quad(a+a^+)(\mid\Psi^{(++)}(\beta')\rangle+\mid\Psi^{(-+)}(\beta')\rangle\mid)] \\
&\quad+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_+(\beta)+E_+(\beta'))t}[(\langle\Psi^{(++)}(\beta)\mid+\langle\Psi^{(-+)}(\beta)\mid)(a+a^+) \\
&\quad(\mid\Psi^{(+-)}(\beta')\rangle+(\mid\Psi^{(--)}(\beta')\rangle)] \\
&\quad+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_+(\beta)+E_+(\beta'))t}[(\langle\Psi^{(+-)}(\beta)\mid+\langle\Psi^{(--)}(\beta)\mid)(a+a^+) \\
&\quad(\mid\Psi^{(++)}(\beta')\rangle+(\mid\Psi^{(-+)}(\beta')\rangle)] \\
&\quad+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_+(\beta')-E_+(\beta))t}[(\langle\Psi^{(+-)}(\beta)\mid+\langle\Psi^{(--)}(\beta)\mid)(a+a^+) \\
&\quad(\mid\Psi^{(+-)}(\beta')\rangle+(\mid\Psi^{(--)}(\beta')\rangle)]\} \\
&=\frac{\Delta}{\sqrt{2}}\int \mathrm{e}^{-\delta(\beta^2+\beta'^2)}\mathrm{d}\beta\mathrm{d}\beta'\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_+(\beta)-E_+(\beta'))t}[(\langle\Psi^{(++)}(\beta)\mid(a+a^+)\mid\Psi^{(-+)}(\beta')\rangle \\
&\quad+\langle\Psi^{(-+)}(\beta)\mid(a+a^+)\mid\Psi^{(++)}(\beta')\rangle]+\mathrm{e}^{\mathrm{i}[E_+(\beta)+E_+(\beta')]t}[\langle\Psi^{(++)}(\beta) \\
&\quad\mid(a+a^+)\mid\Psi^{(--)}(\beta')\rangle]t \\
&\quad+\langle\Psi^{(-+)}(\beta)\mid(a+a^+)\mid\Psi^{(+-)}(\beta')\rangle] \\
&\quad+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_+(\beta)+E_+(\beta'))t}[(\langle\Psi^{(+-)}(\beta)\mid(a+a^+)\mid\Psi^{(-+)}(\beta')\rangle+\langle\Psi^{(--)}(\beta) \\
&\quad(a+a^+)\mid\Psi^{(++)}(\beta')\rangle] \\
&\quad+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_+(\beta')-E_+(\beta))t}[(\langle\Psi^{(+-)}(\beta)\mid(a+a^+)\mid\Psi^{(--)}(\beta')\rangle+\langle\Psi^{(--)}(\beta)\mid \\
&\quad(a+a^+)\mid\Psi^{(+-)}(\beta')\rangle]
\end{aligned}
\tag{2.4.46}
$$

最后一个等式的得到来自$(a+a^{+})$必须在不同宇称态间求期待值时才不为零，因此最后等式的左方有一半矩阵元为零. 分别计算(2.4.46)式的各矩阵元

$$
\begin{aligned}
&\text{(i)}\ \langle \Psi^{++}(\beta) \mid (a+a^{+}) \mid \Psi^{(-+)}(\beta') \rangle = \langle \Psi_1^{++}(\beta) \mid (a+a^{+}) \mid \Psi_1^{(-+)}(\beta') \rangle \\
&= \langle \Psi_2^{(++)}(\beta) \mid (a+a^{+}) \mid \Psi_2^{(-+)}(\beta') \rangle \\
&= \langle 0 \mid (e^{\frac{1}{2}aa-i\beta a} - e^{\frac{1}{2}aa+i\beta a}) \mid (a+a^{+}) \mid (e^{\frac{1}{2}a^{+}a^{+}+i\beta' a^{+}} + e^{\frac{1}{2}a^{+}a^{+}-i\beta a^{+}}) \mid 0 \rangle \\
&\quad + \left(\frac{-A^2 \beta\beta'}{(E_{+}\ \varphi mc^2)^2 (E+\varphi^{1}) + mc^2} \right) \langle 0 \mid (e^{\frac{1}{2}aa-i\beta a} + e^{\frac{1}{2}aa+i\beta a}) \mid (a+a^{+}) \mid \\
&\quad (e^{\frac{1}{2}a^{+}a^{+}+i\beta' a^{+}} - e^{\frac{1}{2}a^{+}a^{+}-i\beta' a^{+}}) \mid 0 \rangle \\
&= 4 \sum_{mn} \langle 2m+2n+1 \mid \frac{(-1)^{n+1} i(\beta)^{2n+1} \sqrt{(2m+2n+1)!}}{2^m m!(2n+1)!} (a+a^{+}) \\
&\quad \sum_{m_1 n_1} \frac{(-1)^{n_1} (\beta')^{2n_1} \sqrt{(2m_1+2n_1)!}}{2^{m_1} m_1!(2n_1)!} \mid 2m_1+2n_1 \rangle \\
&\quad - \frac{4A^2 \beta\beta'}{((E+(\beta)+mc^2)(E+(\beta')+mc^2)} \sum_{mn} \langle 2m+2n-1 \mid \\
&\quad \frac{(-1)^n (\beta)^{2n} \sqrt{(2m+2n)!}}{2^m m!(2n)!} (a+a^{+}) \sum_{m_1 n_1} \frac{(-1)^{n_1} i(\beta')^{2n_1+1} \sqrt{(2m_1+2n_1+1)!}}{2^{m_1} m_1! \sqrt{(2n_1+1)!}} \\
&\quad \mid 2m_1+2n_1+1 \rangle \\
&= 4 \sum_{\substack{mn \\ m_1 n_1}} \langle 2m+2n+1 \mid \frac{(-1)^{n+1} i(\beta)^{2n+1} \sqrt{(2m+2n+1)!}}{2^m m!(2n+1)!} \\
&\quad \left[\frac{(-1)^{n_1} (\beta')^{2n_1} \sqrt{(2m_1+2n_1)!} \sqrt{(2m_1+2n_1)}}{2^{m_1} m_1!(2n_1)!} \right] \mid 2m_1+2n_1-1 \rangle \\
&\quad + \frac{(-1)^{n_1} (\beta')^{2n_1} \sqrt{(2m_1+2n_1)!} \sqrt{(2m_1+2n_1+1)}}{2^{m_1} m_1!(2n_1)!} \mid 2m_1+2n_1+1 \rangle] \\
&\quad \frac{-4A^2 \beta\beta'}{(E_{+}\ (\beta)+mc^2)(m_{+}\ (\beta')+mc^2)} \langle 2m+2n \mid \frac{(-1)^n (\beta)^{2n} \sqrt{(2m+2n)!}}{2^m m!(2n)!} \\
&\quad \left[\frac{(-1)^{n_1} (\beta')^{2n_1+1} \sqrt{(2m_1+2n_1)!} \sqrt{(2m_1+2n_1)}}{2^{m_1} m_1!(2n_1)!} \right] \mid 2m_1+2n_1 \rangle \\
&\quad + \frac{(-1)^{n_1} i(\beta')^{2n_1+1} \sqrt{(2m_1+2n_1+1)!} \sqrt{(2m_1+2n_1+2)}}{2^{m_1} m_1!(2n_1+1)!} \mid 2m_1+2n_1+2 \rangle \\
&= 4 \sum_{mm m_1} \frac{(-1)^{m+2n-m_1+2} i(\beta)^{2n+1} (\beta')^{2m+2n-2m_1+2} (2m+2n+2)!}{2^m m!(2n+1)! 2^{m_1} m_1!(2m+2n-2m_1+2)!} \\
&\quad + \frac{(-1)^{m+2n-m_1+1} i(\beta)^{2n+1} (\beta')^{2m+2n-2m_1} (2m+2n+1)!}{2^m m!(2n+1)! 2^{m_1} (2m+2n-2m_1)!}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&-4\,\frac{A^2\beta\beta'}{(E+(\beta)+mc^2)(E+(\beta')+mc^2)} \\
&\sum_{nmm_1}\left[\frac{(-1)^{m+2n-m_1}\,\mathrm{i}(\beta)^{2n}(\beta')^{2m+2n+(-2m)}(2m+2n+1)!}{2^m m!\,2_1^m m_1!\,(2n)!\,(2m+2n-2m_1+1)!}\right. \\
&\left.+\frac{(-1)^{m+2n-m_1-1}\,\mathrm{i}(\beta)^{2n}(\beta')^{2m+2n-2m_1}(2m+2n)!}{2^m m!\,2^{m_1} m_1!\,(2n)!\,(2m+2n-2m_1-1)!}\right]
\end{aligned}
\tag{2.4.47}
$$

(ii) $\langle\Psi^{(-+)}(\beta)|(a+a^+)|\Psi^{(++)}(\beta')\rangle$

$$
=(\langle\Psi^{(++)}(\beta')|(a+a^+)|\Psi^{(-+)}(\beta)\rangle)^* \tag{2.4.48}
$$

以上冗长的计算过程表明如下几点：一是 Dirac 在他的原著中虽然阐明了电子的 Zitterbewegung 的物理根源，但完全清晰地将这一物理机制具体计算出来是需要较多的理论分析和演算工作的；二是在具体讨论的过程中还会看到一个真实的粒子的物理状态总是以一个波包的形式出现；三是利用演算的公式将实际的参量代入算出粒子的运动就不在这里列出. 但如想在实验中去实现这一物理现象时以上的计算公式就可用来算出理论的结果和实验作比较.



第3章 角 动 量

量子理论中角动量的物理内容是非常丰富的.从上一章的讨论知道,当把相对论的协变性和量子理论结合得到 Dirac 方程时就能立即看出,粒子除了原有的轨道角动量外,还具有内禀的自旋角动量.另一方面从算符的角度看,角动量既服从和玻色算符一样的对易关系又具有和费米算符一样的反对易关系,这使得对它的处理有一定的难度.将角动量作一较为详尽的讨论是量子理论体系中的一个必要的部分,本书的这一部分将更着重于角动量算符玻色化的内容.

3.1 角动量的基本性质

3.1.1 基本对易关系

若一个算符包含三个分量

$$\hat{\boldsymbol{j}} = (\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z)$$

且它的三个分量满足如下的基本对易关系

$$\begin{aligned} [\hat{j}_x, \hat{j}_y] &= \mathrm{i}\hbar\hat{j}_z \\ [\hat{j}_y, \hat{j}_z] &= \mathrm{i}\hbar\hat{j}_x \\ [\hat{j}_z, \hat{j}_x] &= \mathrm{i}\hbar\hat{j}_y \end{aligned} \tag{3.1.1}$$

则不论其具体的物理含义如何,均可称为角动量算符.进一步地,再定义角动量平方算符

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2 \tag{3.1.2}$$

及角动量的升、降算符

$$\begin{aligned} \hat{j}_+ &= \hat{j}_x + \mathrm{i}\hat{j}_y \\ \hat{j}_- &= \hat{j}_x - \mathrm{i}\hat{j}_y \end{aligned} \tag{3.1.3}$$

根据(3.1.1)式的基本对易式可直接证明以下的对易关系

$$[\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}_x] = [\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}_y] = [\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}_z] = 0 \tag{3.1.4}$$

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] = \pm \hbar\hat{j}_\pm \tag{3.1.5}$$

$$[\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hbar\hat{j}_z \tag{3.1.6}$$

$$[\hat{j}_+, \hat{j}_-]_+ = 2(\hat{j}^2 - \hat{j}_z^2) \tag{3.1.7}$$

注意:(3.1.7)式的左方是反对易式,从这一点可以看到角动量算符间既有对易关系,也有反对易关系,不像玻色子算符只有对易关系和费米子算符只具有反对易关系,这就是前面谈到的它的复杂性所在.

从(3.1.4)式看出角动量平方算符和任一分量都可对易. 以$\hat{j}^2$,$\hat{j}_z$为例. 它们的对易说明存在它们的共同本征态矢,用$|\lambda m\rangle$来标志这样的共同本征态,即$|\lambda m\rangle$满足

$$\begin{aligned} \hat{j}^2 \, |\lambda m\rangle &= \lambda\hbar^2 \, |\lambda m\rangle \\ \hat{j}_z \, |\lambda m\rangle &= m\hbar \, |\lambda m\rangle \end{aligned} \tag{3.1.8}$$

将本征值有意写成$\lambda\hbar^2$和$m\hbar$并分别引进一个$\hbar^2$因子和$\hbar$因子是为了以后讨论的方便.

3.1.2 λ,m 的取值

(a) 从$[\hat{j}^2, \hat{j}_+] = \hat{j}^2 \hat{j}_+ - \hat{j}_+ \hat{j}^2 = 0$出发,求它们在$\langle\lambda' m'|$及$|\lambda m\rangle$间的矩阵元,得

$$\langle\lambda' m'|(\hat{j}^2 \hat{j}_+ - \hat{j}_+ \hat{j}^2)|\lambda m\rangle = \langle\lambda' m'|\lambda'\hbar^2 \hat{j}_+ - \hat{j}_+ \lambda\hbar^2|\lambda m\rangle = 0$$

即

$$(\lambda' - \lambda)\langle\lambda' m'|\hat{j}_+|\lambda m\rangle = 0$$

从上面的等式知,只有$\lambda=\lambda'$时$\langle\lambda' m'|\hat{j}_+|\lambda m\rangle$才会不为0. 所以有

$$\langle\lambda' m'|\hat{j}_+|\lambda m\rangle = \delta_{\lambda'\lambda}\langle\lambda m'|\hat{j}_+|\lambda m\rangle \tag{3.1.9}$$

对$\hat{j}_-$有类似的结果. 由于上述矩阵元两边的λ必须相同,因此今后矩阵元$\langle\lambda m'|\hat{j}_+|\lambda m\rangle$可简写为$\langle m'|\hat{j}_+|m\rangle$.

类似还可得出$\hat{j}_x$,$\hat{j}_y$,$\hat{j}_z$的矩阵元对λ量子数也是保持不变的结果.

(b) 从$[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] = \pm\hbar\hat{j}_\pm$出发求$\langle m'|$与$|m\rangle$间的矩阵元,得

$$\langle m'|\hat{j}_z\hat{j}_\pm - \hat{j}_\pm \hat{j}_z|m\rangle = \langle m'|(m'\hbar\hat{j}_\pm - \hat{j}_\pm m\hbar)|m\rangle = \pm\hbar\langle m'|\hat{j}_\pm|m\rangle$$

即

$$(m' - m \mp 1)\langle m'|\hat{j}_\pm|m\rangle = 0$$

上式告诉我们只有$m' = m\pm 1$时$\langle m'|\hat{j}_\pm|m\rangle$才会不为0. 所以有

$$\langle m'|\hat{j}_\pm|m\rangle = \delta_{m', m\pm 1}\langle m\pm 1|\hat{j}_\pm|m\rangle \tag{3.1.10}$$

结合(3.1.9)和(3.1.10)式可写出

$$\langle\lambda' m'|\hat{j}_\pm|\lambda m\rangle = \delta_{\lambda'\lambda}\delta_{m', m\pm 1}\langle\lambda m\pm 1|\hat{j}_\pm|\lambda m\rangle \tag{3.1.11}$$

(c) 从$[\hat{j}_+,\hat{j}_-]=2\hbar\hat{j}_z$出发，等式两边取矩阵元，因为从前面已知对$\lambda$总是对角的. 为书写的简便，$\lambda$可略去不写.

$$\langle m'|(\hat{j}_+\hat{j}_- - \hat{j}_-\hat{j}_+)|m\rangle = 2\hbar\langle m'|\hat{j}_z|m\rangle = 2\hbar\delta_{m'm}\cdot m\hbar \tag{3.1.12}$$

在上式左端插入$\sum_{m''}|m''\rangle\langle m''|=1$并取$m'=m$的情形，得

$$\begin{aligned}&\sum_{m''}\{\langle m|\hat{j}_+|m''\rangle\langle m''|\hat{j}_-|m\rangle - \langle m|\hat{j}_-|m''\rangle\langle m''|\hat{j}_+|m\rangle\}\\&=\langle m|j_+|m-1\rangle\langle m-1|j_-|m\rangle - \langle m|j_-|m+1\rangle\langle m+1|\hat{j}_+|m\rangle\\&=2m\hbar^2\end{aligned} \tag{3.1.13}$$

另一方面，由于

$$\hat{j}_- = \hat{j}_x - i\hat{j}_y = (\hat{j}_x + i\hat{j}_y)^+ = (\hat{j}_+)^+$$

故有

$$\langle m-1|\hat{j}_-|m\rangle = (\langle m|\hat{j}_+|m-1\rangle)^*$$

利用这一关系，(3.1.13)式可写成

$$|\langle m|\hat{j}_+|m-1\rangle|^2 - |\langle m+1|\hat{j}_+|m\rangle|^2 = 2m\hbar^2 \tag{3.1.14}$$

现在把要求的矩阵元写成

$$\langle m+1|\hat{j}_+|m\rangle = \rho_m\hbar$$

则(3.1.14)式可写成

$$|\rho_{m-1}|^2 - |\rho_m|^2 = 2m$$

其解是

$$|\rho_m|^2 = c - m(m+1) \tag{3.1.15}$$

由于$|\rho_m|^2$是正定的，因此一定有$m(m+1)\leqslant c$. 在c给定后m一定有上界$\overline{m}$及下界$\underline{m}$，它们是由方程

$$m(m+1)=c$$

的两个根给出

$$\left.\begin{aligned}\overline{m} &= \frac{1}{2}[-1+\sqrt{1+4c}]\\ \underline{m} &= \frac{1}{2}[-1-\sqrt{1+4c}]\end{aligned}\right. \rightarrow \left\{\begin{aligned}\overline{m}+\underline{m} &= -1\\ \overline{m}\cdot\underline{m} &= -c\end{aligned}\right. \tag{3.1.16}$$

此外，考虑到m每次升降为1，所以有

$$\overline{m}-\underline{m}=n' \quad (\text{正整数})$$

结合(3.1.16)的第一式，有

$$2\overline{m}=\overline{m}+\underline{m}+(\overline{m}-\underline{m})=n'-1=n \quad (\text{正整数})$$

最后得出

$$\bar{m} \equiv j = \begin{cases} \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \cdots & (\text{半整数}) \\ 0,1,2,\cdots & (\text{整数}) \end{cases} \tag{3.1.17}$$

以及

$$\begin{aligned} |\rho_m|^2 &= c - m(m+1) = \bar{m}(\bar{m}+1) - m(m+1) \\ &= j(j+1) - m(m+1) \\ &= (j-m)(j+m+1) = |\langle m+1|\hat{j}_+|m\rangle|^2/\hbar^2 \end{aligned} \tag{3.1.18}$$

(d) 最后讨论 λ 的取值问题，由

$$\hat{j}^2 = \hat{j}_z^2 + \frac{1}{2}(\hat{j}_+\hat{j}_- + \hat{j}_-\hat{j}_+)$$

取对角矩阵元

$$\begin{aligned} \langle \lambda m|\hat{j}^2|\lambda m\rangle = \lambda\hbar^2 &= \langle \lambda m|\hat{j}_z^2|\lambda m\rangle + \frac{1}{2}\langle \lambda m|(\hat{j}_+\hat{j}_- + \hat{j}_-\hat{j}_+)|\lambda m\rangle \\ &= m^2\hbar^2 + \frac{1}{2}\{\langle m|\hat{j}_+|m-1\rangle\langle m-1|\hat{j}_-|m\rangle + \langle m|\hat{j}_-|m+1\rangle \\ &\quad \langle m+1|\hat{j}_+|m\rangle\} \\ &= m^2\hbar^2 + \frac{\hbar^2}{2}\{|\rho_{m-1}|^2 + |\rho_m|^2\} \\ &= m^2\hbar^2 + \frac{\hbar^2}{2}\{(j-m+1)(j+m) + (j-m)(j+m+1)\} \\ &= m^2\hbar^2 + \hbar^2\{j^2 - m^2 + j\} = j(j+1)\hbar^2 \end{aligned} \tag{3.1.19}$$

注意在上面的推导中，仿照(3.1.19)式中的推导，在第二项的矩阵元中也类似地插入了 $\sum_{m'}|m'\rangle\langle m'| = 1$. 将(3.1.19)与(3.1.8)式的第一式比较最后得到

$$\lambda = j(j+1) \tag{3.1.20}$$

同时由(3.1.19)式得

$$m^2 = \lambda - \frac{1}{2}\{|\rho_{m-1}|^2 + |\rho_m|^2\}$$

即

$$m^2 \leqslant \lambda = j(j+1)$$

因此有

$$m_{\max} = j, \quad m_{\min} = -j \tag{3.1.21}$$

经过以上的讨论可以把所有得到的结果归纳如下：

(a) $\hat{j}^2|jm\rangle = j(j+1)\hbar^2|jm\rangle$

$\hat{j}_z|jm\rangle = m\hbar|jm\rangle$ (3.1.22)

其中 $j=\begin{cases}0,1,2,\cdots\\ \frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\cdots\end{cases}$

(b) $\langle j'm'|\hat{j}_{\pm}|jm\rangle=\hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\delta_{j'j}\delta_{m',m\pm 1}$ (3.1.23)

至此,我们可以得出以下的结论:(1)所有结果和在量子力学中讨论具有确定物理含义的轨道角动量的结果完全相同;(2)值得强调的是,这里没有从一个具有明确物理含义和具有明显表达式的角动量算符出发,而是仅从满足基本定义的角动量算符对易式出发得到了普遍的结果,因此包括自旋在内的任何角动量算符都具有上述导出的性质.对于基本粒子的同位旋这些结论也同样适用.

3.2 角动量算符的玻色化

在讨论角动量算符性质时曾提到它的对易关系既不是玻色算符的纯粹对易关系,也不是费米算符的纯粹反对易关系,因此计算和处理起来常常是比较复杂的.为此,人们一直想法用某些玻色型的算符去代替它,以使得计算变得更系统化及更易于推演.在量子理论的发展中提出了两种玻色化的方案:一种是 Holstein-Primakov 变换,另一种是 Schwinger 的双振子理论,它们在现代的研究工作中经常被用到.后面将会看到,玻色化方案在角动量性质的进一步讨论中会起到很好的作用.

3.2.1 Holstein-Primakov 变换

可以将角动量算符和一种玻色算符按下列的关系联系起来,即

$$\begin{aligned}\hat{J}_{+}&=\sqrt{2J-a^{+}a}\,a\\ \hat{J}_{-}&=a^{+}\sqrt{2J-a^{+}a}\\ \hat{J}_{z}&=J-a^{+}a\end{aligned}\tag{3.2.1}$$

其中 a,a^{+} 是玻色子的湮灭和产生算符.右方的 J 表示这一变换关系是针对角动量的大小为确定的 J 值的角动量算符的,所以这一变换不是对整个角动量的空间而言的,它是在 J 一定的子空间中的变换.附带还要作一个说明,为了与目前论文中常用的形式一致,在这一节中总是取 $\hbar=1$.

现在来证明由(3.2.1)式右方表示的算符的确满足角动量算符的基本对易式.为此,下面只证明它满足(3.1.5)及(3.1.6)式,其余的对易式可类似地证明.首先,在下面列出玻色算符 a,a^{+} 的对易式

$$\begin{aligned}&[a,a^{+}]=1\\ &[a,a]=[a^{+},a^{+}]=0\end{aligned}\tag{3.2.2}$$

证明过程如下：

(a) $[\hat{j}_+,\hat{j}_-]=(\sqrt{2J-a^+a})aa^+(\sqrt{2J-a^+a})-a^+(\sqrt{2J-a^+a})$

$(\sqrt{2J-a^+a})a$

$=(\sqrt{2J-a^+a})(a^+a+1)(\sqrt{2J-a^+a})-a^+(2J-a^+a)a$

$=(a^+a+1)(2J-a^+a)-2Ja^+a+a^+(aa^+-1)a$

$=2(J-a^+a)$

$=2\hat{J}_z$

我们在第三等式后利用了(a^+a+1)和$(2J-a^+a)$可对易的性质.

(b) $[\hat{J}_z,\hat{J}_+]=(J-a^+a)\sqrt{2J-a^+a}a-\sqrt{2J-a^+a}a(J-a^+a)$

$=\sqrt{2J-a^+a}\{(J-a^+a)a-a(J-a^+a)\}$

$=\sqrt{2J-a^+a}(aa^+a-a^+aa)$

$=\sqrt{2J-a^+a}a$

$=\hat{J}_+$

类似可证$[\hat{j}_z,\hat{j}_-]=-\hat{j}_-$.

虽然 Holstein-Primakov 用一个玻色算符来表示角动量算符的确有它便捷之处，但它也有一个不足之处，那就是(3.2.1)式的第一式和第二式中右方的算符a^+a在根号里面. 除了它作用到数算符的本征态矢可以直接将 a^+a 换成数算符的本征值n 外，在其余的情形下是很难作严格计算的. 很多研究工作常利用它作算符的近似展开，例如将$\sqrt{2J-a^+a}$近似地取作$\sqrt{2J}\left(1-\frac{1}{4J}a^+a\right)$或甚至就近似取作$\sqrt{2J}$. 这种做法在 $J\gg1$ 时是比较好的近似.

3.2.2 Schwinger 的振子理论

这个理论没有前面所述的 H-P 变换中玻色算符 a^+a 在根号下面的困难，但其代价是需要引入两类玻色子来使角动量玻色化.

设有两类玻色子算符 $a(a^+)$及 $b(b^+)$，它们是相互独立的并具有以下的对易关系

$$
\begin{aligned}
&[a,a^+]=1=[b,b^+]\\
&[a,a]=[a^+,a^+]=[b,b]=[b^+,b^+]=0\\
&[a,b]=[a,b^+]=[a^+,b]=[a^+,b^+]=0
\end{aligned}
\tag{3.2.3}
$$

由它们可构造出三个新的算符

$$\hat{j}_x=\frac{1}{2}(a^+b+b^+a)=\hat{j}_x^+$$

$$\hat{j}_y = \frac{1}{2\mathrm{i}}(a^+ b - b^+ a) = \hat{j}_y^+$$
$$\hat{j}_z = \frac{1}{2}(a^+ a - b^+ b) = \hat{j}_z^+ \tag{3.2.4}$$

可以由(3.2.4)式定义的 $\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z$ 证明它们的确满足角动量算符的基本性质

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{j}_k$$

对于玻色子算符 a, b,可以如前定义它们的数算符

$$\hat{n}_a = a^+ a$$
$$\hat{n}_b = b^+ b \tag{3.2.5}$$

它们和引入的 $\hat{j}_z, \hat{j}^2$ 之间有如下的关系

$$\hat{j}_z = \frac{a^+ a - b^+ b}{2} = \frac{\hat{n}_a - \hat{n}_b}{2} \tag{3.2.6}$$

$$\hat{j}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2 = \frac{\hat{n}}{2}\left(\frac{\hat{n}}{2} + 1\right) \tag{3.2.7}$$

其中

$$\hat{n} = \hat{n}_a + \hat{n}_b \tag{3.2.8}$$

现在证明(3.2.7)式

$$\begin{aligned}
\hat{j}^2 &= \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2 \\
&= \frac{1}{4}(a^+ b + b^+ a)^2 - \frac{1}{4}(a^+ b - b^+ a)^2 + \frac{1}{4}(\hat{n}_a - \hat{n}_b)^2 \\
&= \frac{1}{4}\{2a^+ a(1 + b^+ b) + 2b^+ b(1 + a^+ a)\} + \frac{1}{4}(\hat{n}_a^2 + \hat{n}_b^2 - 2\hat{n}_a\hat{n}_b) \\
&= \frac{1}{4}\{\hat{n}_a^2 + \hat{n}_b^2 + 2\hat{n}_a\hat{n}_b + 2\hat{n}_a + 2\hat{n}_b\} \\
&= \frac{\hat{n}}{2}\left(\frac{\hat{n}}{2} + 1\right)
\end{aligned}$$

(3.2.4)及(3.2.5)两式表明两类玻色子的数算符的共同本征态也是 $\hat{j}^2$ 及 $\hat{j}_z$ 的共同本征态.

在上一节里曾用不少的篇幅去讨论 $\hat{j}^2, \hat{j}_z$ 的本征值 λ, m 的取值情况,现在再用 Schwinger 的振子理论来讨论,将会看到这些结果可以十分简捷地得到并具有清晰的物理图像.

由第一章知道 $\hat{n}_a, \hat{n}_b$ 具有如下的归一的本征态

$$|n_a, n_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_a!\, n_b!}}(a^+)^{n_a}(b^+)^{n_b}|0\rangle \tag{3.2.9}$$

它满足以下的方程

$$\hat{n}_a|n_a,n_b\rangle = n_a|n_a,n_b\rangle$$
$$\hat{n}_b|n_a,n_b\rangle = n_b|n_a,n_b\rangle \tag{3.2.10}$$

其中 n_a,n_b 都是正整数. 利用(3.2.6)式将 $\hat{j}^2,\hat{j}_z$ 作用到 $|n_a,n_b\rangle$ 上去有

$$\hat{j}_z|n_a,n_b\rangle = \frac{1}{2}(\hat{n}_a-\hat{n}_b)|n_a,n_b\rangle$$
$$= \frac{1}{2}(n_a-n_b)|n_a,n_b\rangle \tag{3.2.11}$$

$$\hat{j}^2|n_a,n_b\rangle = \frac{\hat{n}_a+\hat{n}_b}{2}\left(\frac{\hat{n}_a+\hat{n}_b}{2}+1\right)|n_a,n_b\rangle$$
$$= \frac{n_a+n_b}{2}\cdot\left(\frac{n_a+n_b}{2}+1\right)|n_a,n_b\rangle \tag{3.2.12}$$

由上两式立即可以得到如下一些结论:

(a) 由于 n_a,n_b 都是正整数,所以如把 $\hat{j}^2$ 的本征值记作 λ,有

$$\lambda = \frac{n_a+n_b}{2}\cdot\left(\frac{n_a+n_b}{2}+1\right)$$
$$= j(j+1) \tag{3.2.13}$$

其中

$$j \equiv \frac{n_a+n_b}{2} = \begin{cases}\text{整数} & 0,1,2,\cdots \quad (n_a+n_b\ \text{为偶})\\ \text{半整数} & \frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\cdots \quad (n_a+n_b\ \text{为奇})\end{cases} \tag{3.2.14}$$

以及记 j_z 的本征值为 m

$$m \equiv \frac{n_a-n_b}{2} = \begin{cases}\text{整数}\\ \text{半整数}\end{cases} \tag{3.2.15}$$

从以上的讨论可以看出,利用 $\hat{j}^2,\hat{j}_z$ 和 $\hat{n}_a,\hat{n}_b$ 的关系 λ,m 的取值情况几乎直接可得,而不需要像上一节中那样的冗长的论证过程.

(b) 由

$$\hat{j}_+ = \hat{j}_x + \mathrm{i}\hat{j}_y = a^+ b$$
$$\hat{j}_- = \hat{j}_x - \mathrm{i}\hat{j}_y = b^+ a \tag{3.2.16}$$

以及 $\hat{j}_+,\hat{j}_-$ 使 m 升、降 1 的意义可看出,$a(a^+)$ 等价于湮灭(产生)$\frac{1}{2}$的 z 方向角动量分量的算符,而 $b(b^+)$ 等价于湮灭(产生)$-\frac{1}{2}$的 z 方向角动量分量的算符.

(c) 由已知的 $\begin{cases}j=\frac{1}{2}(n_a+n_b)\\ m=\frac{1}{2}(n_a-n_b)\end{cases}$ 可得 $\begin{cases}n_a=j+m\\ n_b=j-m\end{cases}$ (3.2.17)

因此$|jm\rangle$可表示为

$$|jm\rangle = |n_a = j+m, n_b = j-m\rangle = \frac{(a^+)^{j+m}(b^+)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}|0\rangle \tag{3.2.18}$$

而

$$|j,j\rangle = |j,(m=j)\rangle = \frac{(a^+)^{2j}(b^+)^0}{\sqrt{(2j)!0!}}|0\rangle = \frac{(a^+)^{2j}}{\sqrt{(2j)!}}|0\rangle$$

$$|j,-j\rangle = \frac{(b^+)^{2j}}{\sqrt{(2j)!}}|0\rangle$$

立即可得

$$|j,m=j+1\rangle = \hat{j}_+|j,j\rangle = a^+ b\frac{(a^+)^{2j}}{\sqrt{(2j)!}}|0\rangle = \frac{(a^+)^{2j+1}}{\sqrt{(2j)!}}b|0\rangle = 0 \tag{3.2.19a}$$

类似有

$$|j,-j-1\rangle = \hat{j}_-|j,-j\rangle = \frac{(b^+)^{2j+1}}{\sqrt{(2j)!}}a|0\rangle = 0 \tag{3.2.19b}$$

这样，对于j取确定的值后m的值必须满足

$$|m| \leqslant j \tag{3.2.20}$$

或

$$m = j, j-1, \cdots, -j+1, -j$$

(d) 引入两个新算符

$$\begin{cases} \hat{k}_+ = a^+ b^+ \\ \hat{k}_- = ab \end{cases} \tag{3.2.21}$$

容易看出，$\hat{k}_+$的作用是使m不变，j增加1，$\hat{k}_-$的作用是使m不变，j减少1.

3.3 角动量的耦合

3.3.1 两个角动量的耦合

一个粒子常同时具有轨道角动量和自旋角动量，这两者之和构成了粒子的总角动量. 两个粒子的体系中每一个粒子都有角动量，它们之和构成体系的总角动

量.角动量是一个矢量，经典的矢量之和就不是简单的两个数的简单相加，在量子理论中还有量子化的效应，所以两个角动量的耦合是需要仔细讨论的.

设有两个互为独立的角动量算符 $\hat{\boldsymbol{J}}_1,\hat{\boldsymbol{J}}_2$，其含义是

$$[\hat{\boldsymbol{J}}_1,\hat{\boldsymbol{J}}_2]=0 \tag{3.3.1}$$

定义它们的总角动量算符为

$$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{J}}_1+\hat{\boldsymbol{J}}_2 \tag{3.3.2}$$

很容易由 $\hat{\boldsymbol{J}}_1,\hat{\boldsymbol{J}}_2$ 的基本对易式和(3.3.1)式导出

$$[\hat{\boldsymbol{J}}_i,\hat{\boldsymbol{J}}_j]=\mathrm{i}\epsilon_{ijk}J_k \tag{3.3.3}$$

即由(3.3.2)式定义的总角动量算符同样具有角动量的基本对易式关系，因此它的 $\hat{J}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 的共同本征态一定也是 $|jm\rangle$ 的形式.现在要问由一定的 $\hat{\boldsymbol{J}}_1$ 和 $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ 合成后能形成一些什么样的总角动量 j？同时要问总角动量的本征态矢 $|jm\rangle$ 与各个角动量的本征态矢 $|j_1m_1\rangle$ 和 $|j_2m_2\rangle$ 之间是什么样的关系？以上的所谓角动量的耦合问题可更明确地归纳为如下两点：

(a) 如前所述，角动量算符是矢量，两个矢量算符相加一定不只是一个单一的总角动量.那么合成后有多少个不同的 j？

(b) 单个角动量的本征态矢 $|j_1m_1\rangle$，$|j_2m_2\rangle$ 的直积一般不会是总角动量算符的本征态矢 $|jm\rangle$，为了看清这点，将 $\hat{j}^2$ 作用到 $|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle$ 上看有什么样的结果

$$\begin{aligned}\hat{j}^2|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle&=(\hat{j}_1^2+\hat{j}_2^2+2\hat{j}_1\hat{j}_2)|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle\\&=[j_1(j_1+1)+j_2(j_2+1)+2\hat{j}_{1z}\hat{j}_{2z}+2\hat{j}_{1x}\hat{j}_{2x}\\&\quad+2\hat{j}_{1y}\hat{j}_{2y}]|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle\\&=[j_1(j_1+1)+j_2(j_2+1)+2m_1m_2+2\hat{j}_{1x}\hat{j}_{2x}\\&\quad+2\hat{j}_{1y}\hat{j}_{2y}]|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle\end{aligned} \tag{3.3.4}$$

由于右方括号内有 $2\hat{j}_{1x}\hat{j}_{2x}+2\hat{j}_{1y}\hat{j}_{2y}$ 这样一些算符，可见 $|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle$ 一般不是 $\hat{j}^2$ 的本征态矢.虽然总角动量本征态矢一般不是分角动量算符本征态矢的简单直积，但会不会是这样的直积的某种组合呢？

为解答上面的问题，在本书中仍借助 Schwinger 的谐振子理论来讨论，为此重复写出上节得到的关系

$$\begin{cases}j=\dfrac{1}{2}(n_a+n_b)\\m=\dfrac{1}{2}(n_a-n_b)\end{cases}\rightarrow\begin{cases}n_a=j+m\\n_b=j-m\end{cases} \tag{3.2.17}$$

因此有

$$
\begin{aligned}
|jm\rangle &= |n_a = j+m, n_b = j-m\rangle \\
&= \frac{(a^+)^{j+m}(b^+)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}|0\rangle
\end{aligned} \tag{3.3.5}
$$

从上式出发可以逐步开展讨论.

(a) 虽然对于一定的 j_1 及 j_2 的两角动量本征态矢 $|j_1m_1\rangle$ 和 $|j_2m_2\rangle$ 的直乘一般不是总角动量 $\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{\boldsymbol{J}}_z$ 的本征态矢,但特殊的 $|j_1, m_1=j_1\rangle|j_2, m_2=j_2\rangle$ 是个例外,这是因为

$$
\begin{aligned}
&\hat{j}^2|j_1j_1\rangle|j_2j_2\rangle \\
&= [\hat{j}_1^2 + \hat{j}_2^2 + 2\hat{j}_{1z}\hat{j}_{2z} + \hat{j}_{1+}\hat{j}_{2-} + \hat{j}_{1-}\hat{j}_{2+}]|j_1j_1\rangle|j_2j_2\rangle \\
&= [j_1(j_1+1) + j_2(j_2+1) + 2j_1j_2 + \hat{j}_{1+}\hat{j}_{2-} + \hat{j}_{1-}\hat{j}_{2+}]|j_1j_1\rangle|j_2j_2\rangle
\end{aligned}
$$

由前面的(3.2.19a)式知

$$
\hat{j}_{1+}|j_1j_1\rangle = 0, \hat{j}_{2+}|j_2j_2\rangle = 0
$$

故上式成为

$$
\hat{j}^2|j_1j_1\rangle|j_2j_2\rangle = (j_1+j_2)(j_1+j_2+1)|j_1j_1\rangle|j_2j_2\rangle \tag{3.3.6}
$$

而且

$$
\begin{aligned}
\hat{j}_z|j_1j_1\rangle|j_2j_2\rangle &= (\hat{j}_{1z}+\hat{j}_{2z})|j_1j_1\rangle|j_2j_2\rangle \\
&= (j_1+j_2)|j_1j_1\rangle|j_2j_2\rangle
\end{aligned} \tag{3.3.7}
$$

可见

$$
|j_1j_1\rangle|j_2j_2\rangle = |j_1+j_2, j_1+j_2\rangle \tag{3.3.8}
$$

即它的确是 $\hat{j}^2, \hat{j}_z$ 的共同本征矢 $|j_1+j_2, j_1+j_2\rangle$.

(b) 现在求 $|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle$. 以下都将在 Schwinger 的振子图像中来进行,为此再回忆一下 (j,m) 的量子数与 (n_a, n_b) 间的关系(3.2.17),以及两种表象的本征态矢之间的如下关系

$$
\begin{aligned}
|jm\rangle &= |n_a = j+m, n_b = j-m\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}(a^+)^{j+m}(b^+)^{j-m}|0\rangle
\end{aligned} \tag{3.2.18}
$$

为区别起见,将总角动量和分角动量对应的玻色子算符标记如下:

(j_1m_1) 对应的振子算符为 $a_1(a_1^+), b_1(b_1^+)$

(j_2m_2) 对应的振子算符为 $a_2(a_2^+), b_2(b_2^+)$

(jm) 对应的振子算符为 $a(a^+), b(b^+)$

为了求 $|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle$,注意如下关系

$$
\hat{j}_-|(j_1+j_2),(j_1+j_2)\rangle = ab^+|n_a = 2(j_1+j_2), n_b = 0\rangle
$$

$$= \sqrt{2(j_1+j_2)}\ |\ n_a = (2j_1+2j_2-1), n_b = 1\rangle$$
$$= \sqrt{2(j_1+j_2)}\ |\ (j_1+j_2), (j_1+j_2-1)\rangle$$

另一方面

$$(\hat{j}_{1-}+\hat{j}_{2-})\ |\ j_1 j_1\rangle\ |\ j_2 j_2\rangle$$
$$= (a_1 b_1^+ + a_2 b_2^+)\ |\ n_{a_1} = 2j_1, n_{b_1} = 0\rangle\ |\ n_{a_2} = 2j_2, n_{b_2} = 0\rangle$$
$$= \sqrt{2j_1}\ |\ n_{a_1} = 2j_1 - 1, n_{b_1} = 1\rangle\ |\ n_{a_2} = 2j_2, n_{b_2} = 0\rangle$$
$$+ \sqrt{2j_2}\ |\ n_{a_1} = 2j_1, n_{b_1} = 0\rangle\ |\ n_{a_2} = 2j_2 - 1, n_{b_2} = 1\rangle$$
$$= \sqrt{2j_1}\ |\ j_1, j_1 - 1\rangle\ |\ j_2, j_2\rangle + \sqrt{2j_2}\ |\ j_1 j_1\rangle\ |\ j_2 j_2 - 1\rangle$$

上两式的左方相等,因此右方也相等,就得到

$$|\ (j_1+j_2), (j_1+j_2-1)\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\ |\ j_1 j_1 - 1\rangle\ |\ j_2 j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\ |\ j_1 j_1\rangle\ |\ j_2 j_2 - 1\rangle \qquad (3.3.9)$$

在上面的推导中将$|jm\rangle$写成$|(j)(m)\rangle$和$|j_1 m_1\rangle$及$|j_2 m_2\rangle$是为了将它和分角动量的本征态矢区别开来.

(c) 继续将$\hat{j}_-$作用于(3.3.10)式的两边

$$\hat{j}_-|\ (j_1+j_2), (j_1+j_2-1)\rangle = ab^+\ |\ n_a = 2(j_1+j_2)-1, n_b = 1\rangle$$
$$= \sqrt{(2j_1+2j_2-1)\cdot 2}\ |\ n_a = 2(j_1+j_2-1), n_b = 2\rangle$$
$$= \sqrt{2}\ \sqrt{(2j_1+2j_2-1)}\ |\ (j_1+j_2)(j_1+j_2-2)\rangle$$
$$= (a_1 b_1^+ + a_2 b_2^+)\left[\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\ |\ n_{a_1} = 2j_1 - 1, n_{b_1} = 1\rangle\ |\ n_{a_2} = 2j_2, n_{b_2} = 0\rangle\right.$$
$$\left.+ \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\ |\ n_{a_1} = 2j_1, n_{b_1} = 0\rangle\ |\ n_{a_2} = 2j_2 - 1, n_{b_2} = 1\rangle\right]$$
$$= \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\left[\sqrt{(2j_1-1)\cdot 2}\ |\ n_{a_1} = 2j_1 - 2, n_{b_1} = 2\rangle\ |\ n_{a_2} = 2j_2, n_{b_2} = 0\rangle\right.$$
$$\left.+ \sqrt{2j_2}\ |\ n_{a_1} = 2j_1 - 1, n_{b_1} = 1\rangle\ |\ n_{a_2} = 2j_2 - 1, n_{b_2} = 1\rangle\right]$$
$$+ \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\left[\sqrt{2j_1}\ |\ n_{a_1} = 2j_1 - 1, n_{b_1} = 1\rangle\ |\ n_{a_2} = 2j_2 - 1, n_{b_2} = 1\rangle\right.$$
$$\left.+ \sqrt{2\cdot(2j_2-1)}\ |\ n_{a_1} = 2j_1, n_{b_1} = 0\rangle\ |\ n_{a_2} = 2j_2 - 2, n_{b_2} = 2\rangle\right]$$

最后得

$$|\ (j_1+j_2), (j_1+j_2-2)\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}\cdot\frac{2j_1-1}{2j_1+2j_2-1}}\,|j_1,j_1-2\rangle\,|j_2,j_2\rangle \\
&\quad+\sqrt{\frac{2j_1j_2}{(j_1+j_2)(2j_1+2j_2-1)}}\,|j_1,j_1-1\rangle\,|j_2,j_2-1\rangle \\
&\quad+\sqrt{\frac{j_2(2j_2-1)}{(j_1+j_2)(2j_1+2j_2-1)}}\,|j_1,j_1\rangle\,|j_2,j_2-2\rangle
\end{aligned}
\tag{3.3.10}
$$

将以上的步骤继续下去便可得出所有的$|(j_1+j_2),(m)\rangle$,并且可以预见它们都会是由不同的$|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle$这样的直积形式构成的线性组合.

(d) 现在看与(3.3.9)式相互正交的另一种组合

$$
\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\,|j_1,j_1-1\rangle\,|j_2,j_2\rangle-\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\,|j_1,j_1\rangle\,|j_2,j_2-1\rangle
\tag{3.3.11}
$$

一方面,这一态矢对应于总角动量投影算符 $\hat{j}_z$ 的本征值是

$$
m=(j_1-1)+j_2=j_1+(j_2-1)=j_1+j_2-1
$$

另一方面,(3.3.11)与(3.3.9)式的$|(j_1+j_2),(j_1+j_2-1)\rangle$正交,但其 m 又和它同是$j_z=m=j_1+j_2-1$,所以它一定不属于总角动量 $j=j_1+j_2$,而只可能是属于$j=j_1+j_2-1$,即应有

$$
\begin{aligned}
&|(j_1+j_2-1),(j_1+j_2-1)\rangle \\
&=\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\,|j_1,j_1-1\rangle\,|j_2,j_2\rangle-\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\,|j_1,j_1\rangle\,|j_2,j_2-1\rangle
\end{aligned}
\tag{3.3.12}
$$

当然它也不可能属于 j_1+j_2-2 或更小的 j,因为它们的最大的 z 方向分量都小于j_1+j_2-1.

从(3.3.12)式出发,如在(b),(c)所做的那样用 $\hat{j}_-=\hat{j}_{1-}+\hat{j}_{2-}$ 作用到上式两边并一直进行下去可得到$|(j_1+j_2-1),(j_1+j_2-1)\rangle$,$|(j_1+j_2-1),(j_1+j_2-2)\rangle$,…,$|(j_1+j_2-1),-(j_1+j_2-1)\rangle$.在求得$|(j_1+j_2-1),(j_1+j_2-2)\rangle$后求与它以及$|(j_1+j_2),(j_1+j_2-2)\rangle$都正交的组合,根据相同的论证会得到

$$
|(j_1+j_2-2),(j_1+j_2-2)\rangle
$$

再用 $\hat{j}_-$ 不断作用就得到所有的$|(j_1+j_2-2),(m)\rangle$.

综合以上的推导过程可得如下的一些结论:

(a) 总角动量算符 $\hat{j}^2$ 及总角动量投影算符 $\hat{j}_z$ 的共同本征态总可用$(\hat{j}_1^2,\hat{j}_{1z})$与$(\hat{j}_2^2,\hat{j}_{2z})$的本征态直积的线性组合表示,即

$$
|j_1,j_2,j,m\rangle=\sum_{m_1m_2}C_{m_1m_2}^{(j_1j_2)}\,|j_1,m_1\rangle\,|j_2,m_2\rangle
\tag{3.3.13}
$$

上式左方中的表示是为了清楚标明是从确定的 j_1 及 j_2 来合成总角动量的，所以在 $|jm\rangle$ 表示的前面加上 j_1 与 j_2 写成 $|j_1,j_2,j,m\rangle$，右方的系数 $C_{m_1m_2}^{(j_1j_2)}$ 就是所谓的 C-G 系数(Clebsch-Gordan 系数). 由以上的讨论还可以看出，任一个 C-G 系数都可以按这种做法得出.

由于对于确定的 j_1,j_2 有以下的封闭关系

$$\sum_{m_1m_2} |j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle\langle j_1m_1|\langle j_2m_2| = 1$$

故有

$$|j_1j_2jm\rangle = \sum_{m_1m_2} |j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle\langle j_1m_1|\langle j_2m_2|j_1j_2,j,m\rangle \tag{3.3.14}$$

将(3.3.13)与(3.3.14)式作比较，可得 C-G 系数的另一种表示

$$C_{m_1m_2}^{(j_1j_2)} = \langle j_1m_1|\langle j_2m_2|j_1j_2,j,m\rangle \tag{3.3.15}$$

(b) 从以上的讨论看到由 j_1,j_2 生成的总角动量大小是 $j=j_1+j_2,j_1+j_2-1,\cdots$，那么 $j_{\min}=$?

为了回答这一问题，先看一下当 j_1,j_2 确定后，有多少种不同的 $|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle$ 这样的直积态矢. 显然，应该有 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 种. 每一个 j 共有 $2j+1$ 个 $|jm\rangle$，由于两种表示的独立态矢的数目应当相同，所以应有以下的等式

$$\sum_{j=j_{\min}}^{j_1+j_2}(2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

利用等差级数的求和公式，上式成为

$$\begin{aligned}&\frac{2(j_1+j_2)+1+(2j_{\min}+1)}{2}[(j_1+j_2)-j_{\min}+1]\\&=(2j_1+1)(2j_2+1)\end{aligned} \tag{3.3.16}$$

可得

$$j_{\min} = \begin{cases} j_1-j_2 & j_1\geqslant j_2 \\ j_2-j_1 & j_1\leqslant j_2\end{cases}$$

即

$$j_{\min} = |j_1-j_2| \tag{3.3.17}$$

至此，我们借助于 Schwinger 振子理论系统地讨论了两个独立角动量的耦合问题.

3.3.2 三个角动量的耦合

(a) 如果考虑三个独立的角动量 $(\hat{j}_1^2,\hat{j}_{1z})$，$(\hat{j}_2^2,\hat{j}_{2z})$，$(\hat{j}_3^2,\hat{j}_{3z})$ 合成的总角动量

$$\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{j}}_1+\hat{\boldsymbol{j}}_2+\hat{\boldsymbol{j}}_3 \tag{3.3.18}$$

最自然的想法是按照两个独立角动量耦合的办法记它们对应的玻色子算符如下

$$(j_1m_1)\sim a_1(a_1^\dagger),b_1(b_1^\dagger)$$

$$
\begin{aligned}
(j_2 m_2) &\sim a_2(a_2^+), b_2(b_2^+) \\
(j_3 m_3) &\sim a_3(a_3^+), b_3(b_3^+) \\
(jm) &\sim a(a^+), b(b^+)
\end{aligned}
\tag{3.3.19}
$$

然后按照以前类似的办法一步一步地导出$|j,m\rangle$，将之用$|j_1,m_1\rangle$，$|j_2,m_2\rangle$，$|j_3,m_3\rangle$的线性组合表示出来. 但是，我们很快会发现在三个角动量耦合的过程中会出现一个在两个角动量耦合时没有遇到的新问题. 为此，我们仿照两个角动量耦合的步骤，看看会遇到什么样的新问题.

第一步：按照以前的论证，显然三个独立角动量耦合成的最大的总角动量和最大的z方向分量的态矢是

$$
|(j_1+j_2+j_3),(j_1+j_2+j_3)\rangle = |j_1,j_1\rangle\,|j_2,j_2\rangle\,|j_3,j_3\rangle \tag{3.3.20}
$$

第二步：和两个角动量耦合的讨论一样，用$\hat{j}_- = \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-} + \hat{j}_{3-}$作用到$|(j_1+j_2+j_3),(j_1+j_2+j_3)\rangle$上，得到

$$
\begin{aligned}
|(j_1+j_2+j_3),(j_1+j_2+j_3-1)\rangle = &\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2+j_3}}\,|j_1,j_1-1\rangle\,|j_2,j_2\rangle\,|j_3,j_3\rangle \\
&+\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2+j_3}}\,|j_1,j_1\rangle\,|j_2,j_2-1\rangle\,|j_3,j_3\rangle \\
&+\sqrt{\frac{j_3}{j_1+j_2+j_3}}\,|j_1,j_1\rangle\,|j_2,j_2\rangle\,|j_3,j_3-1\rangle
\end{aligned}
\tag{3.3.21}
$$

不断重复上述步骤可由$\hat{j}_-$得到全部的$|(j_1+j_2+j_3),(m)\rangle$.

第三步：当我们求$|(j_1+j_2+j_3-1),(m)\rangle$的态矢时，仿照两角动量耦合的情形，我们要求与(3.3.21)式正交且又是由那些直积的态矢重新组合起来的新态矢以得到$|(j_1+j_2+j_3-1),(j_1+j_2+j_3-1)\rangle$时，会发现存在三种选择

$$
\begin{aligned}
&\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\,|j_1,j_1-1\rangle\,|j_2,j_2\rangle\,|j_3,j_3\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\,|j_1,j_1\rangle\,|j_2,j_2-1\rangle\,|j_3,j_3\rangle \\
&\sqrt{\frac{j_3}{j_2+j_3}}\,|j_1,j_1\rangle\,|j_2,j_2-1\rangle\,|j_3,j_3\rangle - \sqrt{\frac{j_2}{j_2+j_3}}\,|j_1,j_1\rangle\,|j_2,j_2\rangle\,|j_3,j_3-1\rangle \\
&\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_3}}\,|j_1,j_1\rangle\,|j_2,j_2\rangle\,|j_3,j_3-1\rangle - \sqrt{\frac{j_3}{j_1+j_3}}\,|j_1,j_1-1\rangle\,|j_2,j_2\rangle\,|j_3,j_3\rangle
\end{aligned}
\tag{3.3.22}
$$

即这里出现了两个独立角动量耦合时没有出现过的不确定性. 为什么会有这样的任意性呢？问题的根源在于下面要谈到的不同的耦合途径.

(b) 耦合的不同途径——不同的表象. 上面谈到在构造态矢$|(j_1+j_2+j_3-1),(j_1+j_2+j_3-1)\rangle$时出现了三种可能性. 实际上，这三种可能性都是合理的、可

行的，而且可以清楚看出这三种选择的态矢表示是不一样的.因此，由它们出发构造出来的$|(j_1+j_2+j_3-1),(m)\rangle$也就不一样了，由此类推，接下去的$|(j_1+j_2+j_3-2),(m)\rangle$也会不相同.于是，在三个角动量耦合时会出现用三个独立角动量的态矢直积的不同组合方式来表示的总角动量态矢，这就是同一总角动量的态矢在不同表象中的不同表示.

这种不同表象产生的根源实际上是对应于三个独立角动量耦合成一个总角动量时的三种不同途径，这三种途径表述如下

$$\begin{cases}\hat{\boldsymbol{j}}_1,\hat{\boldsymbol{j}}_2\text{ 先耦合成}\hat{\boldsymbol{j}}_1+\hat{\boldsymbol{j}}_2=\hat{\boldsymbol{j}}_{12}\text{ 再与}\hat{\boldsymbol{j}}_3\text{ 耦合成}\hat{\boldsymbol{j}}_{12}+\hat{\boldsymbol{j}}_3=\hat{\boldsymbol{J}}\\ \hat{\boldsymbol{j}}_2,\hat{\boldsymbol{j}}_3\text{ 先耦合成}\hat{\boldsymbol{j}}_2+\hat{\boldsymbol{j}}_3=\hat{\boldsymbol{j}}_{23}\text{ 再与}\hat{\boldsymbol{j}}_1\text{ 耦合成}\hat{\boldsymbol{j}}_{23}+\hat{\boldsymbol{j}}_1=\hat{\boldsymbol{J}}\\ \hat{\boldsymbol{j}}_3,\hat{\boldsymbol{j}}_1\text{ 先耦合成}\hat{\boldsymbol{j}}_3+\hat{\boldsymbol{j}}_1=\hat{\boldsymbol{j}}_{31}\text{ 再与}\hat{\boldsymbol{j}}_2\text{ 耦合成 }\hat{\boldsymbol{j}}_{31}+\hat{\boldsymbol{j}}_2=\hat{\boldsymbol{J}}\end{cases}$$

这三种不同的途径实际上就对应着(3.3.22)式中的三种选择性.明白了这个道理后，余下的步骤不过就是选择一个途径然后按两角动量耦合时的相同步骤作下去就可以了，不同的只是作了第一次耦合后还要再作一次耦合.附带要说明一点，尽管从原则上讲三种耦合途径是完全平权的，但在具体问题中还是有依问题的不同而选择某个途径对解问题更为有利的情形.

(c) 三种表象的等价性.虽然有三种途径来表示三个角动量的耦合，即可在三种不同的表象中来表述总角动量的态矢，但实际上总角动量的态矢应当是唯一确定的，因此我们需要选两种耦合方式为例来说明三种表象的等价性.不失一般性，假定$j_1\geqslant j_2\geqslant j_3$，这样我们可以将它们写成

$$j_1=j_3+P+Q,j_2=j_3+Q,j_3$$

(i) $\hat{\boldsymbol{j}}_1,\hat{\boldsymbol{j}}_2$ 先合成，然后与 $\hat{\boldsymbol{j}}_3$ 合成：按前面的二角动量耦合的讨论可知，$\hat{\boldsymbol{j}}_2$ 合成后的 j_{12}取值如下

$$2j_3+P+2Q,2j_3+P+2Q-1,\cdots,P \tag{3.3.23}$$

然后再将 $\hat{\boldsymbol{j}}_{12}$与 $\hat{\boldsymbol{j}}_3$ 合成，合成后的取值情况如下：

如 $P>j_3$，则合成后的总角动量 $\boldsymbol{J}$ 为

$$3j_3+P+2Q,\cdots,P-j_3 \tag{3.3.24}$$

如 $j_3>P$，首先需要把(3.3.23)式的取值情况写得稍为详细一点以便于讨论.这时的$\hat{\boldsymbol{j}}_{12}$和$\hat{\boldsymbol{j}}_3$ 合成，如$\hat{\boldsymbol{j}}_{12}$，$\hat{\boldsymbol{j}}_3$ 中的一个是整数角动量，一个是半整数角动量时，则 $\hat{\boldsymbol{j}}_{12}$详细一点写出为

$$j_{12}=2j_3+P+2Q,2j_3+P+2Q-1,\cdots,j_3+\frac{1}{2},j_3-\frac{1}{2},\cdots,P \tag{3.3.25}$$

如 $\hat{\boldsymbol{j}}_{12}$与 $\hat{\boldsymbol{j}}_3$ 同是整数角动量或同是半整数时，则 $\hat{\boldsymbol{j}}_{12}$详细一点写出为

$$j_{12} = 2j_3 + P + 2Q, 2j_3 + P + Q - 1, \cdots, j_3, j_3 - 1, \cdots, P \quad (3.3.26)$$

则合成为 j 时最大的仍为 $3j_3 + P + 2Q$，而最小的在(3.3.25)式的情形下是 $j_3 + \frac{1}{2}$，和 j_3 相差为$\frac{1}{2}$. 在(3.3.26)式的情形下 j_3 与 j_3 的相差为 0，因此最后合成的 j 为

$$j = 3j_3 + P + 2Q, \cdots, 0\left(或\frac{1}{2}\right) \quad (3.3.27)$$

(ii) $\hat{\boldsymbol{J}}_2$，$\hat{\boldsymbol{J}}_3$ 先合成，然后再与 $\hat{\boldsymbol{J}}_1$ 合成

$$\hat{\boldsymbol{J}}_2, \hat{\boldsymbol{J}}_3 \text{ 合成后} \quad j_{23} = 2j_3 + Q, 2j_3 + Q - 1, \cdots, Q \quad (3.3.28)$$

然后将 $\hat{\boldsymbol{J}}_{23}$ 与 $\hat{\boldsymbol{J}}_1$ 合成.

如 $P > j_3$，则 $\qquad j_1 = j_3 + P + Q > 2j_3 + Q$

因此合成的最大值为

$$j_3 + P + Q + 2j_3 + Q = 3j_3 + P + 2Q$$

$2j_3 + Q$ 与 j_1 合成的最小值为

$$j_3 + P + Q - (2j_3 + Q) = P - j_3$$

故合成的 j 的取值为

$$3j_3 + P + 2Q, 3j_3 + P + 2Q - 1, \cdots, P - j_3 \quad (3.3.29)$$

和前面的结果(3.3.24)式一致.

如 $j_3 > P$，则 $\qquad 2j_3 + Q > j_3 + P + Q = j_1$

把 j_{23} 的取值写得更详细一点为

$$j_{23} = 2j_3 + Q, 2j_3 + Q - 1, \cdots, j_3 + P + Q\left(或\ j_3 + P + Q + \frac{1}{2}\right), \cdots, Q$$

因此合成的最大取值为

$$j_3 + P + Q + 2j_3 + Q = 3j_3 + P + 2Q$$

而合成的最小值为

$$j_3 + P + Q\left(或\ j_3 + P + Q + \frac{1}{2}\right) - (j_3 + P + Q) = 0\left(或\frac{1}{2}\right) \quad (3.3.30)$$

也和前面的(3.3.27)式 j 的取值一致. 这个总角动量的取值情况不因耦合的顺序不同而不同的结论正是我们所预期的.

3.4 高角动量算符的矩阵表示

在上节中我们讨论了角动量的玻色化，借助 Schwinger 的振子理论使得角动量耦合的运算图像更清晰、具体，而且推广到多个角动量的合成也是直接的. 随着理论与实验的发展，高角动量系统会经常遇到，例如囚禁阱中的多个带有自旋的多粒子体系，因此常需要使用高角动量算符的矩阵表示. 在这一节中我们仍然利用

Schwinger 的振子理论来导出任意的角动量算符的普遍表示.

3.4.1 角动量算符的矩阵表示

(a) 把前面已经讨论过的角动量算符和玻色子算符以及角动量本征态矢和玻色子的本征态矢间的关系重新表示如下

$$\begin{cases} \hat{j}_x = \dfrac{1}{2}(a^+ b + b^+ a) \\ \hat{j}_y = -\dfrac{\mathrm{i}}{2}(a^+ b - b^+ a) \\ \hat{j}_z = \dfrac{1}{2}(a^+ a + b^+ b) \end{cases} \tag{3.4.1}$$

$$|j,m\rangle = |n_a = j+m, n_b = j-m\rangle$$

(b) 把总角动量为 j 的所有不同 z 分量的本征态矢写成一个一列的行列式

$$\begin{pmatrix} |j,j\rangle \\ |j,j-1\rangle \\ \vdots \\ |j,m\rangle \\ \vdots \\ |j,-j+1\rangle \\ |j,-j\rangle \end{pmatrix} \tag{3.4.2}$$

(c) $\hat{j}_z$ 的矩阵表示:将$\hat{j}_z$ 作用到(3.4.2)的一个矩阵元上,有

$$\begin{aligned} \hat{j}_z |j,m\rangle &= \sum_m \frac{1}{2}(a^+ a - b^+ b)|n_a = j+m, n_b = j-m\rangle \\ &= \sum_m \frac{1}{2}(j+m-j+m)|n_a = j+m, n_b = j-m\rangle \\ &= \sum_m m\,|n_a = j+m, n_b = j-m\rangle \\ &= \sum_m m\,|j,m\rangle \end{aligned} \tag{3.4.3}$$

因此$\hat{j}_z$ 算符的矩阵表示为对角矩阵

$$\hat{j}_z = \begin{bmatrix} j & & & & \\ & j-1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -j+1 & \\ & & & & -j \end{bmatrix} \tag{3.4.4}$$

(d) $\hat{j}_x$ 的矩阵表示：将$\hat{j}_x$ 作用到(3.4.2)的一个矩阵元上，有

$$\begin{aligned}
\hat{j}_x \mid j,m\rangle &= \sum_{m=-j}^{j} \frac{1}{2}(a^+ b - b^+ a) \mid n_a = j+m, n_b = j-m\rangle \\
&= \sum_{m=-j}^{j-1} \frac{1}{2} \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \mid n_a = j+m+1, n_b = j-m-1\rangle \\
&\quad + \sum_{m=-j+1}^{j} \frac{1}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \mid n_a = j+m-1, n_b = j-m+1\rangle \\
&= \sum_{m=-j}^{j-1} \frac{1}{2} \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \mid j,m+1\rangle \\
&\quad + \sum_{m=-j+1}^{j} \frac{1}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \mid j,m-1\rangle
\end{aligned} \tag{3.4.5}$$

因此$\hat{j}_x$ 算符的矩阵表示如下：

$$\hat{j}_x = \begin{bmatrix}
0 & \frac{\sqrt{2j}}{2} & & & & & \\
\frac{\sqrt{2j}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2(2j-1)}}{2} & & & & \\
& \frac{\sqrt{2(2j-1)}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{3(2j-2)}}{2} & & & \\
& & \frac{\sqrt{3(2j-2)}}{2} & 0 & & & \\
& & & & \ddots & \frac{\sqrt{2(2j-1)}}{2} & \\
& & & & \frac{\sqrt{2(2j-1)}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2j}}{2} \\
& & & & & \frac{\sqrt{2j}}{2} & 0
\end{bmatrix} \tag{3.4.6}$$

(e) $\hat{j}_y$ 的矩阵表示：

将$\hat{j}_y$ 作用到(3.4.2)的一个矩阵元上，有

$$\begin{aligned}
\hat{j}_y \mid j,m\rangle &= \sum_{m=-j}^{j} \frac{\mathrm{i}}{2}(b^+ a - a^+ b) \mid n_a = j+m, n_b = j-m\rangle \\
&= \sum_{m=-j+1}^{j} \frac{\mathrm{i}}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \mid n_a = j+m-1, n_b = j-m+1\rangle \\
&\quad - \sum_{m=-j}^{j-1} \frac{\mathrm{i}}{2} \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \mid n_a = j+m+1, n_b = j-m-1\rangle
\end{aligned}$$

$$= \sum_{m=-j}^{j-1} \frac{i}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \mid j,m-1\rangle$$
$$- \sum_{m=-j+1}^{j} \frac{i}{2} \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \mid j,m+1\rangle \tag{3.4.7}$$

因此$\hat{j}_y$ 算符的矩阵表示如下：

$$\hat{j}_y = \begin{bmatrix} 0 & \frac{-i\sqrt{2j}}{2} & & & & & \\ \frac{i\sqrt{2j}}{2} & 0 & \frac{-i\sqrt{2(2j-1)}}{2} & & & & \\ & \frac{i\sqrt{2(2j-1)}}{2} & 0 & \frac{-i\sqrt{3(2j-2)}}{2} & & & \\ & & \frac{i\sqrt{3(2j-2)}}{2} & 0 & & & \\ & & & & \ddots & \frac{-i\sqrt{2(2j-1)}}{2} & \\ & & & & \frac{i\sqrt{2(2j-1)}}{2} & 0 & \frac{-i\sqrt{2j}}{2} \\ & & & & & \frac{i\sqrt{2j}}{2} & 0 \end{bmatrix} \tag{3.4.8}$$

3.4.2 案例 $j=\frac{5}{2}$

$$\hat{j}_x = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\sqrt{5}}{2} & & & & \\ \frac{\sqrt{5}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{8}}{2} & & & \\ & \frac{\sqrt{8}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{9}}{2} & & \\ & & \frac{\sqrt{9}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{8}}{2} & \\ & & & \frac{\sqrt{8}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{5}}{2} \\ & & & & \frac{\sqrt{5}}{2} & 0 \end{bmatrix} \tag{3.4.9}$$

$$\hat{j}_y = \begin{bmatrix} 0 & \frac{-i\sqrt{5}}{2} & & & & \\ \frac{i\sqrt{5}}{2} & 0 & \frac{-i\sqrt{8}}{2} & & & \\ & \frac{i\sqrt{8}}{2} & 0 & \frac{-i\sqrt{9}}{2} & & \\ & & \frac{i\sqrt{9}}{2} & 0 & \frac{-i\sqrt{8}}{2} & \\ & & & \frac{i\sqrt{8}}{2} & 0 & \frac{-i\sqrt{5}}{2} \\ & & & & \frac{i\sqrt{5}}{2} & 0 \end{bmatrix} \tag{3.4.10}$$

$$\hat{j}_z = \begin{bmatrix} \frac{5}{2} & & & & & \\ & \frac{3}{2} & & & & \\ & & \frac{1}{2} & & & \\ & & & -\frac{1}{2} & & \\ & & & & -\frac{3}{2} & \\ & & & & & -\frac{5}{2} \end{bmatrix} \tag{3.4.11}$$

最后指出一点，不论$\hat{j}_x$，$\hat{j}_y$，$\hat{j}_z$ 用的一般矩阵表示(3.4.4)，(3.4.6)，(3.4.8)式或者是例子的(3.4.9)，(3.4.10)，(3.4.11)式，都能直接证明它们的确满足基本对易式

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = 2i\,\hat{j}_k \tag{3.4.12}$$

第 4 章　动力学的路径积分形式

在第 1 章中我们谈到，由于量子理论中物理系统的时间演化不具有轨道的概念，与经典粒子沿确定的轨道运动之间存在本质的差别，从而引起了对于对应原理的质疑，当时曾提到这一疑难将在路径积分一章中予以详细解答. 另一方面，物理系统的动力学演化问题是物理学的中心课题. 在量子力学教程中，对一些物理系统需按其特定的哈密顿量形式寻找恰当的数学方法去求解薛定谔方程，但能严格求解的例子并不多. 于是人们自然会提出这样的思想，能否把理论转换成一个适用于求解不同性质物理系统的动力学问题的统一形式？即使对大多数的物理系统而言，这种统一的方法也许不能给出严格的解，但它也能对不同的物理系统给出近似解的统一方法来. 这就是本章要讨论的动力学路径积分形式的目的. 这一理论形式的中心思想是传播子的概念.

4.1　传　播　子

4.1.1　基本概念

动力学的中心问题是讨论物理系统随时间的变化规律. 用薛定谔图像来描述就是要求出物理系统的态矢 $|\psi(t)\rangle$ 如何随时间变化. 如前一个时刻 t' 时系统的态矢是 $|\psi(t')\rangle$，稍后的时刻 t 时是 $|\psi(t)\rangle$，则两者显然可由一个算符 $\hat{U}(t,t')$ 联系起来.

$$\hat{U}(t,t') \mid \psi(t')\rangle = \mid \psi(t)\rangle \tag{4.1.1}$$

$\hat{U}(t,t')$ 称作系统的时间演化算符，它满足如下的初始条件

$$\hat{U}(t,t') = 1 \tag{4.1.2}$$

因此动力学问题可以转化为求演化算符 $\hat{U}(t,t')$. 利用薛定谔方程($\hbar=1$)

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} \mid \psi(t)\rangle = \hat{H} \mid \psi(t)\rangle \tag{4.1.3}$$

立即可得 $|\psi(t)\rangle=\theta(t)\exp(-\mathrm{i}\hat{H}t)|\psi(0)\rangle$，因此有

$$\hat{U}(t,0) = \theta(t)\exp(-\mathrm{i}\hat{H}t) \tag{4.1.4}$$

其中

$$\theta(t)=\begin{cases}1 & t>0\\ 0 & t<0\end{cases} \tag{4.1.5}$$

现在讨论自由粒子的演化算符在位置空间中的矩阵元

$$D_F^{(0)}(x,t;x_0,0)\equiv\langle x\mid \hat{U}^{(0)}(t,0)\mid x_0\rangle \tag{4.1.6}$$

将(4.1.4)式代入(4.1.6)式中并考虑到自由粒子的哈密顿量为 $H_0=\dfrac{p^2}{2m}$,得

$$\begin{aligned}D_F^{(0)}(x,t;x_0,0)&=\langle x\mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t}\mid x_0\rangle\theta(t)\\&=\theta(t)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{2\pi}\langle x\mid p\rangle\langle p\mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{p}^2}{2m}t}\mid x_0\rangle\\&=\theta(t)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{2\pi}\langle x\mid p\rangle\mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{p^2}{2m}t}\langle p\mid x_0\rangle\\&=\theta(t)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-x_0)-\mathrm{i}\frac{p^2}{2m}t}\\&=\theta(t)\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}t}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m(x-x_0)^2}{2t}}\end{aligned} \tag{4.1.7}$$

我们把 D_F 叫做“传播子”. 上式的 $D_F^{(0)}$ 就是自由粒子的传播子,它的物理意义是 $t=0$ 时粒子居于 x_0 到 t 时粒子居于 x 处的几率幅,因为如 $t=0$ 时粒子居于 x_0,则

$$\langle x\mid\psi(0)\rangle=\psi(x,0)=\delta(x-x_0) \tag{4.1.8}$$

记 t 时刻粒子的波函数为 $\psi(x,t)$,有

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\langle x\mid\psi(t)\rangle\\&=\langle x\mid\hat{U}(t,0)\mid\psi(0)\rangle\\&=\int\langle x\mid\hat{U}(t,0)\mid x'\rangle\langle x'\mid\psi(0)\rangle\mathrm{d}x'\\&=\int D_F(x,t;x',0)\psi(x',0)\mathrm{d}x'\\&=\int D_F(x,t;x',0)\delta(x'-x_0)\mathrm{d}x'\\&=D_F(x,t;x_0,0)\end{aligned} \tag{4.1.9}$$

上式左方的 $\psi(x,t)$ 正是粒子在 t 时刻处于 x 的几率幅.

4.1.2 传播子的路径积分表示

把传播子写得更对称一点

$$D_F(x_f,t_f;x_i,t_i)=\theta(t_f-t_i)\langle x_f\mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t_f-t_i)}\mid x_i\rangle \tag{4.1.10}$$

它是 t_i 时粒子居于 x_i 而 t_f 时居于 x_f 的几率幅(波函数). 现在把时间 t_f-t_i 分成 n 格

$$\varepsilon = \frac{t_f - t_i}{n} \tag{4.1.11}$$

并在 $n-1$ 个中间的格点处($t_l = t_i + l\varepsilon$)插入

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \mid x\rangle\langle x \mid \tag{4.1.12}$$

在格点数 $n \to \infty$,即 $\varepsilon \to 0$ 时

$$\begin{aligned}\langle x_l \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}} \mid x_{l-1}\rangle &= \langle x_l \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(x)\right)} \mid x_{l-1}\rangle \\ &\approx \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon V(x_l)}\langle x_l \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\frac{\hat{p}^2}{2m}} \mid x_{l-1}\rangle + 0(\varepsilon^2)\end{aligned} \tag{4.1.13}$$

上面第二等式的近似相等源自将 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(x)\right)}$ 分开成 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\frac{\hat{p}^2}{2m}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon V(x)}$ 时差了一个对易式$\left[\varepsilon\frac{\hat{p}^2}{2m}, \varepsilon V(x)\right] \sim \varepsilon^2$ 以及更高的 ε 的幂次. 当$\varepsilon \to 0$ 时便可略去 $0(\varepsilon^2)$的项. 现在再在$\langle x_l | \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\frac{\hat{p}^2}{2m}} | x_{l-1}\rangle$中插入

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p}{2\pi} \mid p\rangle\langle p \mid$$

并重复(4.1.7)式的计算得

$$\langle x_l \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\frac{\hat{p}^2}{2m}} \mid x_{l-1}\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\varepsilon}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{m}{2\varepsilon}(x_l - x_{l-1})^2} \tag{4.1.14}$$

将(4.1.14)式代入(4.1.13)式中并取极限 $\varepsilon \to 0(n \to \infty)$,有

$$\begin{aligned}D_F(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \lim_{n\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\varepsilon}\right)^{\frac{n}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_{n-1}\cdots\mathrm{d}x_1\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\sum_{l=1}^{n}\left[m\frac{(x_l - x_{l-1})^2}{2\varepsilon} - \varepsilon V(x_l)\right]} \\ &= \int D[x(t)]\mathrm{e}^{\mathrm{i}S[x(t)]}\end{aligned} \tag{4.1.15}$$

最后一个等式中两个符号的意义分别是:

(a) $\int D[x(t)]$ 表示$\lim\limits_{n\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\varepsilon}\right)^{\frac{n}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_{n-1}\cdots\mathrm{d}x_1$ 这样的路径积分.

(b) 再看(4.1.15)式指数上的表示式$\left[m\frac{(x_l - x_{l-1})^2}{2\varepsilon} - \varepsilon V(x_l)\right]$,其中的 x_l 是粒子在 $t_i + l\varepsilon$ 时的位置. x_{l-1} 是粒子在 $t_i + (l-1)\varepsilon$ 时的位置. $\varepsilon = \Delta t$. 所以在 $\varepsilon = \Delta t \to 0$ 时,它在形式上可以看做

$$\begin{aligned}&\left[m\frac{(x(t_i + l\Delta t) - x(t_i + (l-1)\Delta t))^2}{2\Delta t} - \Delta t V(x(t_i + l\Delta t))\right] \\ &= \Delta t\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\Delta x}{\Delta t}\right)^2 - V(x)\right]\end{aligned}$$

因此(4.1.15)式中的被积函数可以形式地看做

$$\lim_{n\to\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sum_{l=1}^{n}\left[m\frac{(x_l - x_{l-1})^2}{2\varepsilon} - \varepsilon V(x_l)\right]} = \exp\left\{\mathrm{i}\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t\left[\frac{m}{2}\dot{x}^2(t) - V(x(t))\right]\right\} \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}S[x(t)]}$$

最后一个恒等式是缩记形式，即形式上和一个经典粒子的作用量相同，但是要强调的是这种相同只是形式的，$\dot{x}$ 不是真正意义上的粒子轨道上的速度，因为这里的 x_{l-1} 与 x_l 实际上都是从 $-\infty$ 变化到 ∞ 的积分变量，而不是粒子在一条确定轨道上的位置.

尽管上面强调了在(4.1.15)式中写出 $S[x(t)]$ 的形式上的意义，但有了这样的表示形式便可在这里讲一下量子到经典理论的过渡问题. 在量子理论一开始时虽然一再强调粒子没有轨道的概念，但在现在的路径积分的形式下可以设想为粒子从 (t_i, x_i) 到 (t_f, x_f) 是沿如图 4.1 所示经过无数多条的轨道到达的，而每条轨道具有一个相应的相因子 $e^{iS[x(t)]}$.

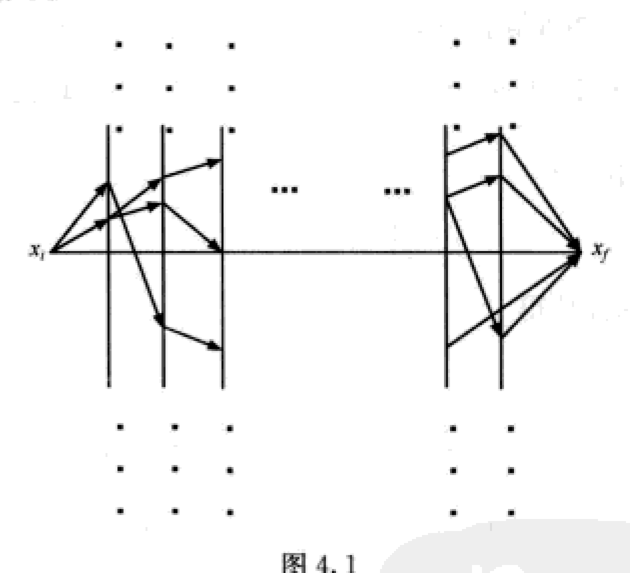


图 4.1

(a) 在无穷多条路径中考虑一根确定的路径，它和它所在的邻域内的其他路径都有相应的相因子. 如果这些相因子相差较大且是无规的，则邻域内的所有路径的贡献之和就会相互抵消.

(b) 在这些路径中有一些是极值路径，其特点是在它的邻域内各种路径的相因子变化小. 于是这些路径之和对几率有显著的贡献.

(c) 当粒子从微观大小转变为宏观大小时不仅那些极值路径的贡献越来越大，而且只有一条路径具有压倒性的贡献，其余的路径贡献都趋于零，这时量子理论就过渡到了经典理论.

4.1.3 频率空间表示

演化算符经常是用频率空间的表示更为方便，即将其时间变量作一傅里叶变换到频率空间中去. 作为下面讨论的准备，先考虑如下的积分

$$I(a) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \frac{i}{\omega - a + i\epsilon} \tag{4.1.16}$$

由于被积函数中包含 $e^{-i\omega t}$ 这个因子，所以(a)在 $t>0$ 时，可以如图 4.2 在实数轴加上一个在 ω 平面下部的半圆构成积分回路. 积分回路包含(4.1.16)式中积分核的极点 $a-i\varepsilon$. (b) $t<0$ 时，则由实数轴加上 ω——平面上部的半圆构成回路. 这时回路中没有极点，因此回路积分为零. 按复数积分的留数定理应有

图 4.2

$$I(a)=\theta(t)e^{-iat} \tag{4.1.17}$$

现在可以利用上面得到的(4.1.16)和(4.1.17)式将自由粒子的演化算符写成

$$\begin{aligned}\hat{U}^{(0)}(t,0)&=\theta(t)e^{-i\hat{H}_0t}\\&=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}\frac{i}{\omega-\hat{H}_0+i\varepsilon}\end{aligned} \tag{4.1.18}$$

人们也许会问，从(4.1.17)式到(4.1.18)式是把数 a 换成了算符 $\hat{H}_0$，这样做能行吗？由于一个是数的等式一个是算符式，这种做法似乎是有问题的，不过不要忘记算符等式只有在作用于态矢上时才有意义. 将任何态矢用 $\hat{H}_0$ 的本征态矢展开并用(4.1.18)式作用于其上时 $\hat{H}_0$ 就转化成它的本征值. 这时(4.1.18)式就和(4.1.17)式等同了，所以这样的代换是可行的. (4.1.18)式就是 $\hat{U}^{(0)}(t,0)$ 到 $\hat{U}^{(0)}(\omega)$ 的变换，即

$$\hat{U}^{(0)}(t,0)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}\hat{U}^{(0)}(\omega) \tag{4.1.19a}$$

$$\hat{U}^{(0)}(\omega)=\frac{i}{\omega-\hat{H}_0+i\varepsilon} \tag{4.1.19b}$$

下面分别讨论频率空间的演化算符 $\hat{U}^{(0)}(\omega)$ 在动量空间及位形空间中的矩阵元.

(a)
$$\begin{aligned}\langle p\mid\hat{U}^{(0)}(\omega)\mid p'\rangle&=\langle p\mid\frac{i}{\omega-\hat{H}_0+i\varepsilon}\mid p'\rangle\\&=\langle p\mid\frac{i}{\omega-\frac{\hat{p}^2}{2m}+i\varepsilon}\mid p'\rangle\\&=\frac{i}{\omega-\frac{p^2}{2m}+i\varepsilon}\langle p\mid p'\rangle\\&=2\pi\delta(p-p')\frac{i}{\omega-\frac{p^2}{2m}+i\varepsilon}\end{aligned} \tag{4.1.20}$$

$$(b)\ \langle x \mid \hat{U}^{(0)}(\omega) \mid x' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} \langle x \mid \frac{i}{\omega - \frac{\hat{p}^2}{2m} + i\varepsilon} \mid p \rangle \langle p \mid x' \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} \frac{i}{\omega - \frac{p^2}{2m} + i\varepsilon} \langle x \mid p \rangle \langle p \mid x' \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} e^{ip(x-x')} \frac{i}{\omega - \frac{p^2}{2m} + i\varepsilon} \tag{4.1.21}$$

引入 p_0

$$p_0 = 2m\omega \tag{4.1.22}$$

则有

$$\langle x \mid \hat{U}^{(0)}(\omega) \mid x' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} e^{ip(x-x')} \frac{i}{\omega - \frac{p^2}{2m} + i\varepsilon}$$

$$= -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} e^{ip(x-x')} \frac{2mi}{p^2 - p_0 - i\varepsilon}$$

$$= -2m \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} e^{ip(x-x')} \frac{i}{(p - p_0 - i\varepsilon)(p + p_0 + i\varepsilon)}$$

这时可仿照前面的讨论.(1)$x-x'>0$ 时在 p 面上由实数轴加一个上部的半圆构成一个回路,其中包含极点 $p_0+i\varepsilon$,故有

$$\langle x \mid \hat{U}^{(0)}(\omega) \mid x' \rangle = 2\pi i \frac{-2mi}{2\pi} \frac{1}{2p_0} e^{ip_0(x-x')}$$

$$= \frac{m}{p_0} e^{ip_0(x-x')} \tag{4.1.23}$$

(2) $x-x'<0$ 时,在 p 面上由实数轴加一个下部的半圆构成回路,回路中包含极点 $-p_0-i\varepsilon$,类似地得到

$$\langle x \mid \hat{U}^{(0)}(\omega) \mid x' \rangle = \frac{m}{p_0} e^{-ip_0(x-x')} \tag{4.1.24}$$

于是可将(4.1.23)和(4.1.24)式合写成

$$\langle x \mid \hat{U}^{(0)}(\omega) \mid x' \rangle = \frac{m}{p_0} e^{ip_0|x-x'|} \tag{4.1.25}$$

4.2 非自由粒子的传播子

4.2.1 非自由粒子传播子的近似解法

前面讨论了自由粒子的传播子,现在讨论受到势作用的非自由粒子的情况.这

时演化算符为

$$\hat{U}(t,0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\hat{H}_0+V(x))t} \tag{4.2.1}$$

相应的传播子为

$$D_F(x',t;x,0)=\langle x' \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\hat{H}_0+V(x))t}\rangle \mid x\rangle \tag{4.2.2}$$

如果系统能严格解出定态方程

$$\hat{H}\mid \varphi_n\rangle=E_n\mid \varphi_n\rangle \quad (n=0,1,2,\cdots) \tag{4.2.3}$$

则传播子即可明显表示为

$$\begin{aligned}D_F(x',t;x,0)&=\sum_n\langle x' \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\hat{H}_0+V(x))t}\mid \varphi_n\rangle\langle\varphi_n\mid x\rangle\\&=\sum_n\langle x'\mid\varphi_n\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt}\langle\varphi_n\mid x\rangle\\&=\sum_n\varphi_n(x')\varphi_n^*(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt}\end{aligned} \tag{4.2.4}$$

利用上式即可求得系统在任何时刻 t 的波函数.将开始时刻的波函数 $\psi(x,0)$ 按 $\varphi_n(x)$ 展开

$$\begin{aligned}\psi(x,0)&=\langle x\mid\psi(x,0)\rangle\\&=\sum_n\langle x\mid\varphi_n\rangle\langle\varphi_n\mid\psi(x,0)\rangle\\&=\sum_n c_n\varphi_n(x)\end{aligned} \tag{4.2.5}$$

其中

$$c_n=\langle\varphi_n\mid\psi(x,0)\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\varphi_n^*(x)\psi(x,0) \tag{4.2.6}$$

另一方面利用(4.2.4)式

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x' D_F(x,t;x',0)\psi(x',0)\\&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'\sum_n\varphi_n(x)\varphi_n^*(x')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt}\psi(x',0)\\&=\sum_n c_n\varphi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt}\end{aligned} \tag{4.2.7}$$

(a) 比较(4.2.5)及(4.2.7)式可知,在已知 $E_n,\varphi_n(x)$ 的情况下,只要把 $\psi(x,0)$ 按 $\varphi_n(x)$ 展开,则系统在任意时刻的波函数只要加上相应的 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt}$ 因子即得.可惜的是在很多情形下不能严格解出定态方程来,所以需要寻求一种系统的近似求解方法.

(b) 讨论 $\hat{V}$ 不依赖于 t 的情形.类似于自由粒子的情形,在这种情形下首先作演化算符的傅里叶变换,沿用得到(4.1.18)式的论证方法,有

$$\hat{U}(t,0)=\theta(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\hat{H}_0+\hat{V})t}$$
$$=\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\frac{\mathrm{i}}{\omega-\hat{H}_0-\hat{V}+\mathrm{i}\varepsilon}$$
$$=\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\hat{K}(\omega)\tag{4.2.8}$$

其中 $\hat{K}(\omega)$为

$$\hat{K}(\omega)\equiv\frac{\mathrm{i}}{\omega-\hat{H}_0-\hat{V}+\mathrm{i}\varepsilon}\tag{4.2.9}$$

称为频率空间的“完全传播子”.

为了下面的讨论,要用到以下的算符公式

$$\frac{1}{\hat{A}-\hat{B}}=\frac{1}{\hat{A}}+\frac{1}{\hat{A}}\hat{B}\frac{1}{\hat{A}}+\frac{1}{\hat{A}}\hat{B}\frac{1}{\hat{A}}\hat{B}\frac{1}{\hat{A}}+\cdots\tag{4.2.10}$$

将$(\hat{A}-\hat{B})$左乘上式的左、右方都得到 1 从而上式得到证明.

利用(4.2.10)式可将完全传播子写成

$$\hat{K}(\omega)=\mathrm{i}\frac{1}{\omega-\hat{H}_0-\hat{V}+\mathrm{i}\varepsilon}$$
$$=\left[\frac{\mathrm{i}}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}+\frac{1}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\hat{V}\frac{1}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\mathrm{i}\right.$$
$$\left.+\frac{1}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\hat{V}\frac{1}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\hat{V}\frac{1}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\mathrm{i}+\cdots\right]$$
$$=\hat{K}^{(0)}(\omega)+\hat{K}^{(0)}(\omega)(-\mathrm{i}\hat{V})\hat{K}^{(0)}(\omega)$$
$$+\hat{K}^{(0)}(\omega)(-\mathrm{i}\hat{V})\hat{K}^{(0)}(\omega)(-\mathrm{i}\hat{V})\hat{K}^{(0)}(\omega)+\cdots\tag{4.2.11}$$

其中

$$\hat{K}^{(0)}(\omega)=\frac{\mathrm{i}}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\tag{4.2.12}$$

是前面的(4.1.19b)式中已引入的“自由传播子”.

4.2.2 两点推论

由(4.2.11)式可以得出以下两点推论.

(a) 回到实时的演化算符 $\hat{U}(t,0)$有

$$\hat{U}(t,0)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\hat{K}(\omega)$$
$$=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}[\hat{K}^{(0)}(\omega)+\hat{K}^{(0)}(\omega)(-\mathrm{i}V)\hat{K}^{(0)}(\omega)+\cdots]$$

$$= \hat{U}^{(0)}(t,0) - \mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \hat{U}^{(0)}(t,t_1)\hat{V}U^{(0)}(t_1,0)$$
$$+(-\mathrm{i})2\int_0^t \mathrm{d}t_2\int_0^t \mathrm{d}t_1 \hat{U}^{(0)}(t,t_2)\hat{V}\hat{U}^{(0)}(t_2,t_1)\hat{V}\hat{U}^{(0)}(t_1,0)+\cdots \tag{4.2.13}$$

其中

$$\hat{U}^{(0)}(t,0) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\frac{\mathrm{i}}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon} = \theta(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t} \tag{4.2.14}$$

为了说明(4.2.13)式的第三等式是如何得到的，以其中的第二项为例来加以说明. 利用公式

$$\delta(\omega-\omega') = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega-\omega')t}\mathrm{d}t \tag{4.2.15}$$

有

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\hat{K}^{(0)}(\omega)(-\mathrm{i}\hat{V})\hat{K}^{(0)}(\omega)$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\frac{\mathrm{i}}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}(-\mathrm{i}\hat{V})\frac{\mathrm{i}}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\frac{\mathrm{i}}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}(-\mathrm{i}\hat{V})\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\delta(\omega'-\omega)\frac{\mathrm{i}}{\omega'-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\frac{\mathrm{i}}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}(-\mathrm{i}\hat{V})\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega-\omega')t_1}\mathrm{d}t_1\frac{\mathrm{i}}{\omega'-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_1\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t_1)}\frac{\mathrm{i}}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}(-\mathrm{i}\hat{V})\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega' t_1}\frac{\mathrm{i}}{\omega'-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}$$
$$= \int_{\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_1\hat{U}^{(0)}(t,t_1)(-\mathrm{i}\hat{V})\hat{U}^{(0)}(t_1,0)$$
$$= \int_0^t \mathrm{d}t_1\hat{U}^{(0)}(t,t_1)(-\mathrm{i}\hat{V})\hat{U}^{(0)}(t_1,0) \tag{4.2.16}$$

最后一个等式将 t_1 的积分限从$(-\infty,\infty)$换写成$(0,t)$是因为

$$\hat{U}^{(0)}(t,t_1) = \theta(t-t_1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0(t-t_1)}$$

及

$$\hat{U}^{(0)}(t_1,0)=\theta(t_1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t_1}$$

中的 $\theta(t-t_1)$和 $\theta(t_1)$限制了 t_1 的取值范围为$(0,t)$.

(b) 由(4.2.11)及(4.2.13)式可求出系统初始态为$|i\rangle$、终态为$|f\rangle$的几率幅[$|i\rangle,|f\rangle$是 $\hat{H}_0$ 的能量本征态].

$$Amp_{f,i}(t)\equiv\langle f\,|\,\hat{U}(t,0)\,|\,i\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= \langle f \mid \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \hat{K}(\omega) \mid i \rangle \\
&= i\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \{ \langle f \mid \frac{1}{\omega - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \mid i \rangle + \langle f \mid \frac{1}{\omega - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \\
&\quad \hat{V} \frac{1}{\omega - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \mid i \rangle + \langle f \mid \frac{1}{\omega - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} \frac{1}{\omega - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \\
&\quad \hat{V} \frac{1}{\omega - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \mid i \rangle + \cdots \} \\
&= i\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \left\{ \frac{1}{\omega - E_i + i\varepsilon} \langle f \mid i \rangle + \frac{1}{\omega - E_f + i\varepsilon} \langle f \mid \hat{V} \mid i \rangle \frac{1}{\omega - E_i + i\varepsilon} \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{\omega - E_f + i\varepsilon} \langle \hat{f} \mid \hat{V} \frac{1}{\omega - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \sum_a \mid a \rangle \langle a \mid \hat{V} \mid i \rangle \frac{1}{\omega - E_i + i\varepsilon} + \cdots \right\} \\
&= i\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \left\{ \delta_{fi} \frac{1}{\omega - E_i + i\varepsilon} + \frac{1}{\omega - E_f + i\varepsilon} \langle f \mid \hat{V} \mid i \rangle \frac{1}{\omega - E_i + i\varepsilon} \right. \\
&\quad \left. + \sum_a \frac{1}{\omega - E_f + i\varepsilon} \langle f \mid \hat{V} \mid a \rangle \frac{1}{\omega - E_a + i\varepsilon} \langle a \mid \hat{V} \mid i \rangle \frac{1}{\omega - E_i + i\varepsilon} + \cdots \right\}
\end{aligned}
\tag{4.2.17}
$$

仿照前面的精神,在 $t>0$ 时即可在 ω 面上添加下大半圆变成回路积分并应用留数定理,上式最终可写成

$$
Amp_{f,i}(t) = \delta_{fi} e^{-iE_i t} + \frac{\langle f \mid \hat{V} \mid i \rangle}{E_f - E_i + i\varepsilon} (e^{-iE_f t} - e^{-iE_i t}) + \cdots \tag{4.2.18}
$$

以上式的第二项为例仔细说明如何由(4.2.17)式得到(4.2.18)式

$$
\begin{aligned}
& i\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega - E_f + i\varepsilon} \cdot \frac{1}{\omega - E_i + i\varepsilon} \langle f \mid \hat{V} \mid i \rangle \\
&= i\int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \frac{\langle f \mid \hat{V} \mid i \rangle}{(\omega - E_f + i\varepsilon)(\omega - E_i + i\varepsilon)} \\
&= \frac{i}{2\pi} \cdot (-2\pi i) \left[e^{-iE_f t} \frac{1}{E_f - E_i + i\varepsilon} + e^{-iE_i t} \frac{1}{E_i - E_f + i\varepsilon} \right] \langle f \mid \hat{V} \mid i \rangle \\
&= \frac{1}{E_f - E_i + i\varepsilon} (e^{-iE_f t} - e^{-iE_i t}) \langle f \mid \hat{V} \mid i \rangle
\end{aligned}
$$

在上面的推导中,从第二行到第三行时就如同前面的推导一样,在 ω 面上加上下大半圆并对两极点 $\omega = E_f - i\varepsilon$ 及 $\omega = E_i - i\varepsilon$ 取留数而得到的结果.

4.2.3 非自由粒子传播子的路径积分推导

为了说明路径积分的有效性并熟悉它的技巧,现在再用路径积分的方法导出(4.2.13)的微扰展开式.

根据前面已导出的传播子，即演化算符在位形空间中的矩阵元的路径积分表示(4.1.16)式，有

$$\begin{aligned}\langle x' \mid \hat{U}(t,0) \mid x\rangle &= \int D[x(t)]\mathrm{e}^{\mathrm{i}S[x(t)]} \\ &= \int D[x(t)]\exp\left\{\mathrm{i}\int_0^t \left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2(t') - V(x(t'))\right]\mathrm{d}t'\right\} \\ &= \int D[x(t)]\exp\left\{\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t'\,\frac{1}{2}m\dot{x}^2(t')\right\} \\ &\quad\cdot\left[1 - \mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t_1 V(x(t_1)) + \frac{1}{2!}\left(\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t_1 V(x(t_1))\right)^2 + \cdots\right]\end{aligned} \tag{4.2.19}$$

注意在路径积分中一切量都已是经典量，不再有算符的对易问题，所以可将指数上的 V 直接展开如上式的最后表示式. 以下分别讨论(4.2.19)式中右方的各项.

(a) 第一项

$$\int D[x(t)]\exp\left\{\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t'\,\frac{1}{2}m\dot{x}^2(t')\right\} = \langle x' \mid \hat{U}^{(0)}(t,0) \mid x\rangle \tag{4.2.20}$$

就是(4.1.6)式中已讨论过的自由粒子演化算符在位置空间中的矩阵元.

(b) (4.2.19)式中第二项的从$(t=0,x)\to(t,x')$的路径积分分成两段

$$(t=0,x)\to(t_1,x'')\to(t,x')$$

上的路径积分，同时对 x''从$-\infty\to\infty$积分，即

$$\begin{aligned}&-\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int D[x(t)]V(x(t_1))\exp\left\{\mathrm{i}\int_0^t \frac{1}{2}m\dot{x}^2(t')\mathrm{d}t'\right\} \\ &= -\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int \mathrm{d}x'' \int D[x(t)]\exp\left\{\mathrm{i}\int_{t_1}^t \frac{1}{2}m\dot{x}^2(t')\mathrm{d}t'\right\}V(x''(t_1) \\ &\quad \int D[x(t)]\exp\left\{\mathrm{i}\int_0^{t_1} \frac{1}{2}m\dot{x}^2(t')\mathrm{d}t'\right\} \\ &= -\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int \mathrm{d}x'' \langle x' \mid \hat{U}^{(0)}(t,t_1) \mid x''\rangle V(x'')\langle x'' \mid \hat{U}^{(0)}(t_1,0) \mid x\rangle \\ &= -\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \langle x' \mid U^{(0)}(t,t_1)\hat{V}U^{(0)}(t_1,0) \mid x\rangle\end{aligned} \tag{4.2.21}$$

(c) 把第三项记为(A)，即

$$\frac{(-\mathrm{i})^2}{2!}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^t \mathrm{d}t_2 V(x(t_1))V(x(t_2))\exp\left\{\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t'\,\frac{1}{2}m\dot{x}^2(t')\right) \equiv (A)$$

仿照第二项把时间分段如下：

当 $t_2>t_1$，时间划分为

$$0(x)\to t_1(x'')\to t_2(x''')\to t(x')$$

当 $t_1>t_2$ 时，时间划分为

$$0(x)\to t_2(x''')\to t_1(x'')\to t(x')$$

于是(A)分成两项,并按照第二项的推演可将其写成

$$\frac{(-\mathrm{i})^2}{2!}\int_0^t \mathrm{d}t_2\int_0^{t_2}\mathrm{d}t_1\int\mathrm{d}x''\int\mathrm{d}x'''\langle x'\mid\hat{U}^{(0)}(t,t_2)\mid x'''\rangle V(x''')$$
$$\cdot\langle x'''\mid\hat{U}^{(0)}(t_2t_1)\mid x''\rangle V(x'')\langle x''\mid\hat{U}^{(0)}(t_10)\mid x\rangle$$
$$+\frac{(-\mathrm{i})^2}{2!}\int_0^t \mathrm{d}t_2\int_{t_2}^{t}\mathrm{d}t_1\int\mathrm{d}x''\int\mathrm{d}x'''\langle x'\mid\hat{U}^{(0)}(t,t_1)\mid x''\rangle V(x'')$$
$$\cdot\langle x''\mid\hat{U}^{(0)}(t_1t_2)\mid x'''\rangle V(x''')\langle x'''\mid\hat{U}^{(0)}(t_20)\mid x\rangle=(\mathrm{A})\quad(4.2.22)$$

现在仔细看一下(4.2.22)式中的两项.

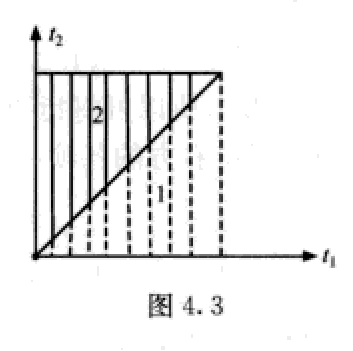


图 4.3

第一项的积分区是正方形的下三角,而第二项的积分区是正方形的上三角(见图 4.3). 但是,考虑到把 t_2 与 t_1 交换一下,两项正好互换而 t_1,t_2 都是积分变量,符号改变积分应当不变,可见两项是相等的. 把两项合并正好消掉$\frac{1}{2!}$因子且将 $\int\mathrm{d}x''\mid x''\rangle\langle x''\mid$ 及$\int\mathrm{d}x'''\mid x'''\rangle\langle x'''\mid$都换成 1,即得到(4.2.13)式的第三项. 于是我们最后又得到

$$\langle x'\mid\hat{U}(t,0)\mid x\rangle=\langle x'\mid[\hat{U}^{(0)}(t,0)-\mathrm{i}\int_0^t\mathrm{d}t_1\hat{U}^{(0)}(t,t_1)\hat{V}(t_1)\hat{U}^{(0)}(t,0)$$
$$+(-\mathrm{i})2\int_0^t\mathrm{d}t_2\int_0^t\mathrm{d}t_1\hat{U}^{(0)}(t,t_2)\hat{V}\hat{U}^{(0)}(t_2,t_1)\hat{V}\hat{U}^{(0)}(t_1,0)$$
$$+\cdots]\mid x\rangle\quad(4.2.23)$$

它和前面得到的(4.2.13)式完全相同. 将导出(4.2.13)式的两种方法作一比较,可以看出路径积分更为简捷.

4.3 传播子是薛定谔方程的格林函数

4.3.1 传播子是格林函数的证明

我们知道,能量本征态矢是定态薛定谔方程的解,而含时薛定谔方程的解是物理系统随时间演化的态矢 $\psi(\boldsymbol{x},t)$,即($\hbar=1$)

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2m}+V(\boldsymbol{x})-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(\boldsymbol{x},t)=0\quad(4.3.1)$$

可以证明传播子 $D_F(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)$满足如下的方程

$$\left(-\frac{1}{2m}\nabla_2^2+V(\boldsymbol{x}_2)-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_2}\right)D_F(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)$$
$$=-\mathrm{i}\delta^3(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{x}_1)\delta(t_2-t_1)\quad(4.3.2)$$

其中∇_2，$\frac{\partial}{\partial t_2}$表示对 $\boldsymbol{x}_2$ 及 t_2 的微商. 这即是说传播子是含时薛定谔方程的格林函数. 证明如下.

从前面讨论的(4.2.4)式已知，如定态方程

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2m}+V(\boldsymbol{x})\right)\varphi_n(\boldsymbol{x})=E_n\varphi_n(\boldsymbol{x}) \tag{4.3.3}$$

的解已知，传播子可表示为

$$D_F(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)=\begin{cases}\sum\limits_n\varphi_n(\boldsymbol{x}_2)\varphi_n^*(\boldsymbol{x}_1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(t_2-t_1)} & t_2\geqslant t_1\\ 0 & t_2<t_1\end{cases} \tag{4.3.4}$$

因此，当 $t_2>t_1$ 时，(4.3.2)式的左端为

$$\begin{aligned}&\left(-\frac{1}{2m}\nabla_2^2+V(\boldsymbol{x}_2)-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_2}\right)\sum_n\varphi_n(\boldsymbol{x}_2)\varphi_n^*(\boldsymbol{x}_1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(t_2-t_1)}\\&=\sum_n\left(-\frac{1}{2m}\nabla_2^2+V(\boldsymbol{x}_2)\varphi_n(\boldsymbol{x}_2)\varphi_n^*(\boldsymbol{x}_1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(t_2-t_1)}\right)\\&\quad+\sum_n\varphi_n(\boldsymbol{x}_2)\varphi_n^*(\boldsymbol{x}_1)\left(-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(t_2-t_1)}\right)\\&=\sum_n(E_n-E_n)\varphi_n(\boldsymbol{x}_2)\varphi^*(\boldsymbol{x}_1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(t_2-t_1)}=0\end{aligned}$$

(4.3.2)式为右端的 $\delta(t_2-t_1)=0$，故(4.3.2)式成立.

当 $t_2<t_1$ 时，(4.3.2)式的左端因 D_F 为零而为零，右端这时 $\delta(t_2-t_1)=0$，故(4.3.2)式也成立.

下面考察在 $t_2=t_1$ 及其邻域处(4.3.2)式是否成立，这时(4.3.2)式右方的 $\delta(t_2-t_1)$将起作用. 根据 δ 函数的性质，准确地讲应当根据(4.3.2)式的两方在 $t_1-\varepsilon\leqslant t_2\leqslant t_1+\varepsilon(\varepsilon\to0)$小范围内的积分是否相等来判断(4.3.2)式成立与否.

先看(4.3.2)式的右方：

$$\lim_{\varepsilon\to0}-\mathrm{i}\int_{t_1-\varepsilon}^{t_1+\varepsilon}\mathrm{d}t_2\delta^3(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{x}_1)\delta(t_2-t_1)=-\mathrm{i}\delta^3(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{x}_1)$$

再看(4.3.2)式的左方：

$$\begin{aligned}&\lim_{\varepsilon\to0}\int_{t_1-\varepsilon}^{t_1+\varepsilon}\mathrm{d}t_2\left(-\frac{\nabla_2^2}{2m}+V(\boldsymbol{x}_2)-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_2}\right)D_F(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)\\&=\lim_{\varepsilon\to0}\Big[2\varepsilon\left(-\frac{\nabla_2^2}{2m}+V(\boldsymbol{x}_2)\right)D_F(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)-\mathrm{i}D_F(\boldsymbol{x}_2,t_1+\varepsilon;\boldsymbol{x}_1,t_1)\\&\quad+\mathrm{i}D_F(\boldsymbol{x}_2,t_1-\varepsilon;\boldsymbol{x}_1,t_1)\Big]\\&=-\mathrm{i}D_F(\boldsymbol{x}_2,t_1;\boldsymbol{x}_1,t_1)\end{aligned}$$

最后一个等式的得来是由于 $\varepsilon\to0$ 时第一项的积分等于被积函数乘积分长度 2ε.

$\epsilon\to 0$ 时，它为 0. 第三项中 $t_2=t_1-\epsilon<t_1$，故为 0. 因此，只剩下第二项.

进一步地，有

$$-\mathrm{i}D_F(\boldsymbol{x}_2,t_1;\boldsymbol{x}_1,t_1)=-\mathrm{i}\sum_n\varphi_n(\boldsymbol{x}_2)\varphi_n^*(\boldsymbol{x}_1)=-\mathrm{i}\delta^3(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{x}_1)$$

至此证明了在所有的情形下(4.3.2)式都成立.

得到传播子是薛定谔方程的格林函数以后，可以证明物理系统的传播子与自由粒子的传播子之间有如下的关系

$$\begin{aligned}D_F(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)=&D_F^{(0)}(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)\\&-\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x_3D_F^{(0)}(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_3,t_3)V(\boldsymbol{x}_3)D_F(\boldsymbol{x}_3,t_3;\boldsymbol{x}_1,t_1)\end{aligned}\tag{4.3.5}$$

或

$$\begin{aligned}D_F(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)=&D_F^{(0)}(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)\\&-\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x_3D_F^{(0)}(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_3,t_3)V(\boldsymbol{x}_3)D_F^{(0)}(\boldsymbol{x}_3,t_3;\boldsymbol{x}_1,t_1)+\cdots\end{aligned}\tag{4.3.6}$$

证明过程如下. 为方便起见，把(4.3.5)式改写成如下形式

$$\begin{aligned}D_F^{(0)}(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)=&D_F(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)\\&+\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x_3D_F^{(0)}(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_3,t_3)V(\boldsymbol{x}_3)D_F(\boldsymbol{x}_3,t_3;\boldsymbol{x}_1,t_1)\end{aligned}$$

为了证明上式成立，用$\left(-\frac{\nabla_2^2}{2m}-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_2}\right)$作用于上式两端.

作用于左端时有

$$\left(-\frac{\nabla_2^2}{2m}-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_2}\right)D_F^{(0)}(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)=-\mathrm{i}\delta^3(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{x}_1)\delta(t_2-t_1)$$

作用于右端有

$$\begin{aligned}&\left(-\frac{\nabla_2^2}{2m}-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_2}\right)D_F(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)+\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x_3\left(-\frac{\nabla_2^2}{2m}-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_2}\right)\\&\quad D_F^{(0)}(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_3,t_3)V(\boldsymbol{x}_3)D_F(\boldsymbol{x}_3,t_3;\boldsymbol{x}_1,t_1)\\&=\left(-\frac{\nabla_2}{2m}-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_2}\right)D_F(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)+\mathrm{i}\int\mathrm{d}^3x_3\mathrm{d}t_3[-\mathrm{i}\delta^3(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{x}_3)\\&\quad\cdot\delta(t_2-t_3)]V(\boldsymbol{x}_3)D_F(\boldsymbol{x}_3,t_3;\boldsymbol{x}_1,t_1)\\&=\left(-\frac{\nabla_2^2}{2m}-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_2}\right)D_F(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)+V(\boldsymbol{x}_2)D_F(\boldsymbol{x}_2,t_2;\boldsymbol{x}_1,t_1)\\&=-\mathrm{i}\delta^3(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{x}_1)\delta(t_2-t_3)\end{aligned}$$

上面最后一个等式用到了(4.3.2)式. 根据(4.3.2)式，比较得到的用$\left(-\frac{\nabla_2^2}{2m}-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_2}\right)$作

用于(4.3.6)式左、右方的结果,发现它们相等,从而证明了(4.3.5)式或(4.3.6)式成立.

4.3.2　小结

一个物理系统在外势作用下随时间的演化规律可以用系统随时间变化的波函数来描述,也可以用传播子来等价地描述.严格求解出传播子通常难以做到,因此需要发展出一种有效的微扰展开方法.前面得到的(4.2.13),(4.2.23)以及(4.3.6)式,其实都是等价的微扰展开的不同表述方法,都是利用已知的自由传播子和给定的外势来展开到无穷阶,实际应用时在一定的近似程度下取到有限阶.尽管这种微扰理论是一个系统的形式比较完美的理论,但它仍存在不适用于强外势情形的局限性.

4.4　大 t 极限情形的虚时延拓和生成泛函

上节末提到本章的中心是用传播子表述的微扰论替代传统的量子力学微扰论,它的优点可概述如下:①形式上是统一的,不会因为物理系统不同而不同;②由下面的大时间间隔的虚时延拓可看出在它基础上还可以发展一些技巧来帮助求解;③这种传播子的描述方式可以自然地过渡到相对论性量子理论——量子场论.

4.4.1　虚时延拓

由前面的讨论知道,如系统的本征值系$\{E_n\}$及本征波函数系$\{\varphi_n(x)\}$已知,则传播子可表示为

$$D_F(x_2,t_2;x_1,t_1)=\sum_n\varphi_n(x_2)\varphi_n^*(x_1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(t_2-t_1)} \tag{4.4.1}$$

如果在问题中考虑大的时间间隔 $t_2-t_1\gg1$ 的情形,则可在讨论的中间过程中将时间延拓到虚时会带来不少的简便.当然在中间计算过程完毕后仍需要再返回到实时.在中间过程中作如下的虚时延拓

$$t_2\to-\mathrm{i}\frac{T}{2},t_1\to\mathrm{i}\frac{T}{2}$$

$$T\gg1 \tag{4.4.2}$$

这时由(4.4.1)式得

$$D_F\left(x_2,-\mathrm{i}\frac{T}{2};x_1,\mathrm{i}\frac{T}{2}\right)=\sum_n\varphi_n(x_2)\varphi_n^*(x_1)\mathrm{e}^{-E_nT}$$

由于 $E_n>E_0(n\neq0)$,所以在虚时延拓以后有

$$D_F\left(x_2,-\mathrm{i}\frac{T}{2};x_1,\mathrm{i}\frac{T}{2}\right)\cong\varphi_0(x_2)\varphi_0^*(x_1)\mathrm{e}^{-E_0T}+o(\mathrm{e}^{-E_1T}) \tag{4.4.3}$$

由上面的近似表示便可以预见延拓以后为什么会简便许多.

4.4.2 生成泛函

下面引入生成泛函的概念,它在后面讨论散射问题时将会用到.从这里再一次看到传播子的方法贯穿了量子理论的各个方面.

我们先从经典理论来入手.一个一维量子系统对应的经典系统的运动方程为

$$m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}=-\frac{\mathrm{d}V(x)}{\mathrm{d}x}$$

现在考虑在该系统的经典方程中原有的力外,再加上一个在某一时间间隔内的外源项,使其运动方程改变成为

$$m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}+\frac{\mathrm{d}V(x)}{\mathrm{d}x}=j(t) \tag{4.4.4}$$

其中 $j(t)$在时间的两端点 t_i,t_f 处为零.这时它的经典作用量为

$$S=\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t\left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2(t)+V(x)+x(t)j(t)\right] \tag{4.4.5}$$

将这一经典对应的量子系统的传播子加一上标 j,表示它是有外源项的传播子.由于前面的讨论已经得到这样的结论,即量子系统的传播子的路径积分表示中被积函数指数上的函数形式就是相应的经典理论的作用量,所以量子系统的传播子 D_{F}^j,按照(4.4.5)式,即可写为

$$D_{\mathrm{F}}^j(x_f,t_f;x_i,t_i)=\int D[x(t)]\exp\left[\mathrm{i}\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2+V(x)+x(t)j(t)\right)\right] \tag{4.4.6}$$

在此基础上定义生成泛函如下

$$W[j(t)]\underset{\substack{T\to\infty\\x_f\to x_i}}{\sim}D_{\mathrm{F}}^j\left(x_f,\frac{T}{2};x_i,-\frac{T}{2}\right) \tag{4.4.7}$$

生成泛函具有以下重要的等式

$$\begin{aligned}&(-\mathrm{i})^n\frac{\delta^2}{\delta j(t_1)\cdots\delta j(t_n)}W[j(t)]\mid_{j=0}\\&=\lim_{T\to\infty}\int D[x(t)]x(t_n)\cdots x(t_1)\exp\left[\mathrm{i}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}t\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2(t)+V(t)\right)\right]\\&=\lim_{T\to\infty}\langle x_f,\frac{T}{2}\mid T(x(t_n)\cdots x(t_1))\mid x_i,-\frac{T}{2}\rangle\end{aligned} \tag{4.4.8}$$

其中 $T(x(t_n)\cdots x(t_1))$叫编时算符,它的定义是将其中的算符按它的时间顺序由右排列到左.例如,对含两个算符的 T 算符有

$$T(\hat{A}(t_2)\hat{B}(t_1))=\theta(t_2-t_1)\hat{A}(t_2)\hat{B}(t_1)+\theta(t_1-t_2)\hat{B}(t_1)\hat{A}(t_2) \tag{4.4.9}$$

(4.4.8)式的第一等式直接可以看出.只需证明第二等式.

(a) 假定这一系列时刻已按顺序排列,即 $t_i<t_1<t_2<\cdots<t_n<t_f$,这时按编时算符的性质有

$$\begin{aligned}&\langle x_f,t_f\mid T(x(t_1)\cdots x(t_n))\mid x_i,t_i\rangle\\&=\langle x_f,t_f\mid x(t_n)x(t_{n-1})\cdots x(t_1)\mid x_i,t_i\rangle\end{aligned}$$

在上式中插入 n 个

$$\int\mid x_k\rangle\langle x_k\mid \mathrm{d}x_k=1$$

得到

$$\begin{aligned}&\langle x_f,t_f\mid T(x(t_1)\cdots x(t_n))\mid x_i,t_i\rangle\\&=\prod_{k=1}^{n}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_k\langle x_f,t_f\mid x_nt_n\rangle x_n\langle x_nt_n\mid x_{n-1}t_{n-1}\rangle x_{n-1}\cdots x_1\langle x_1,t_1\mid x_i,t_i\rangle\\&=\prod_{k=1}^{n}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_kD_F\left(x_f,\frac{T}{2};x_nt_n\right)x_nD_F(x_n,t_n;x_{n-1},t_{n-1})x_{n-1}\cdots x_1\\&\quad D_F\left(x_1,t_1\mid x_i,-\frac{T}{2}\right)\\&=\prod_{k=1}^{n}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_k\mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{t_n}^{t_f}\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2+V(x)\right)\mathrm{d}t}x_n\mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{t_{n-1}}^{t_n}\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2+V(x)\right)\mathrm{d}t}x_{n-1}\cdots x_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{t_i}^{t_1}\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2+V(x)\right)\mathrm{d}t}\\&=\int D[x(t)]x(t_n)\cdots x(t_1)\exp\left[\mathrm{i}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}t\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2(t)+V(t)\right)\right]\end{aligned}$$

于是(4.4.8)式的第二等式得以证明.

(b) 如这一系列的时刻取其他的时间序列,由于编时算符的作用,它总会将恰当的 $x(t)$ 放在它应有的时间位置上. 按前一样的论证,仍然得出相应的 $x(t_n)\cdots x(t_1)$ 因子及 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\left[\frac{m}{2}\dot{x}^2+V(x)\right]\mathrm{d}t}$,这样(4.4.8)式的第二等式也一样得证.

4.5　谐振子系统

在这一章里引入了传播子的概念,通过它把量子理论中动力学问题的讨论纳入到一个系统的理论框架中去,而过去量子理论中讨论过的内容都可在这一形式下得到重现. 不仅如此,应用这一个系统的理论形式还可以对具体的物理问题作更为深入和系统的讨论. 为此,本节中以谐振子系统为例应用本章的理论再来讨论一次.

4.5.1　谐振子内容回顾

第 1 章中曾讨论过谐振子问题. 谐振子系统的哈密顿量为

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{k}{2}x^2$$

引入

$$\omega^2 = \frac{k}{m}$$

以及湮灭及产生算符

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2}}x + \frac{\mathrm{i}\hat{p}}{\sqrt{2m\omega}}$$

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2}}x - \frac{\mathrm{i}\hat{p}}{\sqrt{2m\omega}}$$

于是 $\hat{H}$ 可改写为

$$\hat{H} = \omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$$

其中 $\hat{N}$ 为数算符

$$\hat{N} = a^+ a$$

因此 $\hat{H}$ 与 $\hat{N}$ 有共同的本征函数系 $\{|n\rangle\}$

$$\hat{N} \mid n\rangle = n \mid n\rangle$$

现在来求这些本征态的波函数.

(a) 先看 $|0\rangle$，即求 $n=0$ 的态的波函数

由前已知

$$a \mid 0\rangle = 0$$

在上式两方左乘以 $\langle x|$ 得

$$\begin{aligned} 0 = \langle x \mid a \mid 0\rangle &= \langle x \mid \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2}}x + \mathrm{i}\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega}}\right] \mid 0\rangle \\ &= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2}}x + \frac{1}{\sqrt{2m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]\langle x \mid 0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2m\omega}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + m\omega x\right)\psi_0(x) \end{aligned} \tag{4.5.1}$$

解出

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{1}{2}m\omega x^2\right) \tag{4.5.2}$$

$\left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$ 是归一因子.

(b) $n=1$ 的 $|1\rangle$ 的波函数

$$\psi_1(x) = \langle x \mid 1\rangle = \langle x \mid \hat{a}^+ \mid 0\rangle$$

$$= \langle x \mid \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2}} x - \mathrm{i} \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega}}\right] \mid 0\rangle$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{2m\omega}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - m\omega x\right)\langle x \mid 0\rangle$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{2m\omega}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - m\omega x\right)\psi_0(x)$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{2m\omega}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - m\omega x\right)\left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}m\omega x^2}$$

$$= \sqrt{2m\omega}x \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}m\omega x^2} \tag{4.5.3}$$

(c) $|n\rangle$的波函数

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x \mid (\hat{a}^+)^n \mid 0\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x \mid \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2}} x - \mathrm{i} \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega}}\right]^n \mid 0\rangle$$

$$= \frac{(-1)^n}{\sqrt{n!}\,(2m\omega)^{\frac{n}{2}}}\langle x \mid \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - m\omega x\right)^n \mid 0\rangle$$

$$= \frac{(-1)^n}{\sqrt{n!}\,(2m\omega)^{\frac{n}{2}}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - m\omega x\right)^n \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}m\omega x^2}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\sqrt{m\omega}x) \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}m\omega x^2} \tag{4.5.4}$$

其中 H_n 是厄米特(Hermite)多项式.

4.5.2 谐振子系统的传播子

传播子的路径积分表示为

$$D_F(x',t;x,0) = \int D[x(t)]\exp(\mathrm{i}S[x(t)]) \tag{4.5.5}$$

前面已讲过,路径积分的意思是粒子从 $t=0$ 时刻居于 x 处演化到 t 时刻居于 x'的几率幅,是由连接两固定端点的 x 及 x'的所有可能路径所对应的相因子 $\exp(\mathrm{i}S[x(t)])$积分而得. 在这无穷多的路径中当然也包括一条特殊的路径——经典轨道. 谐振子的经典轨道满足的运动方程是

$$\ddot{x}_d(t) = -\omega^2 x_d(t)$$

$$\begin{cases} x_d(0) = x \\ x_d(t) = x' \end{cases} \tag{4.5.6}$$

它的作用量是

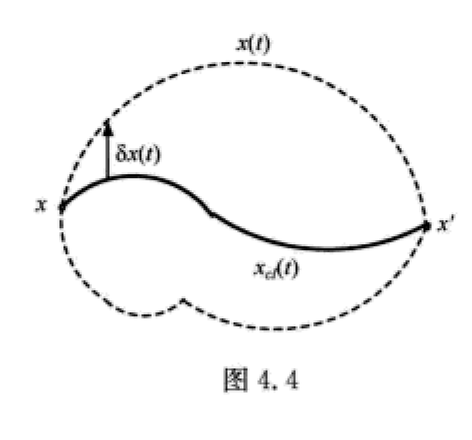


图 4.4

$$S[x_d]=\int_0^t \frac{m}{2}(\dot{x}_d^2-\omega^2 x_d)\mathrm{d}t' \tag{4.5.7}$$

如图 4.4 所示所有的可能路径可以用 $x(t)$ 来表示. 但它们也可以按经典轨道为基准的偏离 δx

$$\delta x(t)=x(t)-x_d(t)$$

来表示. 即对所有的 $x(t)$ 的路径积分可以代之以对所有的 $\delta x(t)$ 的积分. 即(4.5.5)式可表示为

$$D_F(x',t;x,0)=\int D[\delta x(t)]\exp\mathrm{i}S[x_d(t)+\delta x(t)] \tag{4.5.8}$$

其中

$$\begin{aligned}S[x_d(t)+\delta x(t)]&=\int_0^t \frac{m}{2}[(\dot{x}_d+\delta\dot{x})^2-\omega^2\ (x_d+\delta x)^2]\mathrm{d}t'\\&=\int_0^t \frac{m}{2}[\dot{x}_d^2+2\dot{x}_d\delta\dot{x}+(\delta\dot{x})^2-\omega^2 x_d^2-2\omega^2 x_d\delta x-\omega^2\ (\delta x)^2]\mathrm{d}t'\\&=S[x_d(t)]+2\int_0^t\mathrm{d}t'\frac{m}{2}[\dot{x}_d(t')\delta\dot{x}(t')-\omega^2 x_d(t')\delta x(t')]\\&\quad+\int_0^t\mathrm{d}t'\frac{m}{2}[(\delta\dot{x}(t'))^2-\omega^2(\delta x(t'))^2]\end{aligned} \tag{4.5.9}$$

上式右方第二项利用分部积分可证为零,即

$$\begin{aligned}&\int_0^t\mathrm{d}t' m[\dot{x}_d(t')\delta\dot{x}(t')-\omega^2 x_d(t')\delta x(t')]\\&=m\,[\dot{x}_d(t')\delta x(t')]_0^t-\int_0^t\mathrm{d}t' m\delta x(t')[\ddot{x}_d(t')+\omega^2 x_d(t')]\\&=0\end{aligned}$$

上式第一项为零是因为在两端点 $\delta x(t)=\delta x(0)=0$. 第二项为零是因经典轨道 $\ddot{x}_d(t)+\omega^2 x_d(t)=0$. 将(4.5.9)式代入(4.5.8)式得

$$\begin{aligned}D_F(x',t;x,0)&=\int D[\delta x(t')]\exp(\mathrm{i}S[x_d])\exp\left(\mathrm{i}\,\frac{m}{2}[(\delta\dot{x}(t'))^2-\omega^2\ (\delta x(t'))^2]\right)\\&=\exp(\mathrm{i}S[x_d])\cdot D_F(0,t;0,0)\end{aligned} \tag{4.5.10}$$

上式的物理意义可以解释如下:谐振子的传播子可以看做由两部分组成. 第一部分是由经典轨道贡献的一个相因子,这个经典轨道是 $(0,x)\to(t,x')$. 第二部分是从 $(0,0)\to(t,0)$ 的传播子,因为现在的 $\delta x(t)$ 与原来表示路径的 $x(t)$ 的意义毫无区别. 换句话说,这一传播子是从原点出发经过所有可能路径在 t 时又回到原点的传播子. 由此得到一个推论,即所有不同的谐振子的传播子 $D_F(x_1',t;x_1,0)$ 和 $D_F(x_2',t;x_2,0)$ 都有共同的 $D_F(0,t;0,0)$ 部分,相差的只是它们中的 $\exp(\mathrm{i}S[x_{d(1)}])$ 和 $\exp(\mathrm{i}S[x_{d(2)}])$. 根据上面的讨论,下面分别来计算 $\exp(\mathrm{i}S[x_d])$ 及 $D_F(0,t;0,0)$.

写出经典轨道的明显表示

$$x_d(t) = A\sin(\omega t + \varphi) \tag{4.5.11}$$

及两端点的值

$$\begin{aligned} x_d(0) &= A\sin\varphi = x \\ x_d(t) &= A\sin(\omega t + \varphi) = x' \end{aligned} \tag{4.5.12}$$

从(4.5.12)式可以将 A,φ 用 x 及 x' 来表示. 由(4.5.12)式的第二式有

$$\begin{aligned} x' &= A\sin(\omega t + \varphi) = A\sin\omega t\cos\varphi + A\cos\omega t\sin\varphi \\ &= A\cos\varphi\sin\omega t + x\cos\omega t \end{aligned}$$

得

$$A\cos\varphi = \frac{x'}{\sin\omega t} - \frac{x\cos\omega t}{\sin\omega t} \tag{4.5.13}$$

将(4.5.12)式的两式相除,得

$$\frac{x}{x'} = \frac{\sin\varphi}{\sin(\omega t + \varphi)} = \frac{\sin\varphi}{\sin\omega t\cos\varphi + \cos\omega t\sin\varphi} \tag{4.5.14}$$

由(4.5.12),(4.5.13)及(4.5.14)式可得

$$\begin{aligned} A^2\sin 2\varphi &= 2A\sin\varphi \cdot A\cos\varphi \\ &= 2x\left(\frac{x'}{\sin\omega t} - \frac{x\cos\omega t}{\sin\omega t}\right) \end{aligned} \tag{4.5.15}$$

$$\begin{aligned} A^2\sin(2\omega t + 2\varphi) &= 2A\sin(\omega t + \varphi) \cdot A\cos(\omega t + \varphi) \\ &= 2x'A(\cos\omega t\cos\varphi - \sin\omega t\sin\varphi) \\ &= 2x'\left[\cos\omega t\left(\frac{x'}{\sin\omega t} - \frac{x\cos\omega t}{\sin\omega t}\right) - x\sin\omega t\right] \\ &= 2x'\left(x'\cot\omega t - \frac{x}{\sin\omega t}\right) \end{aligned} \tag{4.5.16}$$

有了以上的准备,就可来计算 $S[x_d(t)]$

$$\begin{aligned} S[x_d(t)] &= \frac{m}{2}\int_0^t dt'[\dot{x}_d^2(t') - \omega^2 x_d^2(t')] \\ &= \frac{m}{2}A^2\omega^2\int_0^t dt'[\cos^2(\omega t' + \varphi) - \sin^2(\omega t' + \varphi)] \\ &= \frac{m}{2}A^2\omega^2\int_0^t dt'\cos(2\omega t' + 2\varphi) \\ &= \frac{m}{4}A^2\omega[\sin(2\omega t + 2\varphi) - \sin 2\varphi] \\ &= \frac{m\omega}{4}\left(2x'^2\cot\omega t - \frac{2x'x}{\sin\omega t} - \frac{2x'x}{\sin\omega t} + 2x^2\cot\omega t\right) \\ &= \frac{m\omega}{2}[(x^2 + x'^2)\cot\omega t - 2xx'\csc\omega t] \end{aligned} \tag{4.5.17}$$

现在转而求 $D_F(0,t;0,0)$. 记

$$D_F(0,t;0,0) \equiv J(t) \tag{4.5.18}$$

利用完备性将传播子改写成

$$\begin{aligned} D_F(x',t;x,0) &= \langle x' \mid e^{-i\hat{H}t} \mid x \rangle = \langle x' \mid e^{-i\hat{H}(t-t_1)} e^{-i\hat{H}t_1} \mid x \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx'' \langle x' \mid e^{-i\hat{H}(t-t_1)} \mid x'' \rangle \langle x'' \mid e^{-i\hat{H}t_1} \mid x \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx'' D_F(x',t;x'',t_1) D_F(x'',t_1;x,0) \end{aligned} \tag{4.5.19}$$

将(4.5.10)式中把 D_F 分成 $J(t)$ 及 $S[x_d]$ 表示的办法应用于上式的两方，得

$$\begin{aligned} & J(t)\exp\left(i\frac{m\omega}{2}[(x^2+x'^2)\cot(\omega t)-2xx'\csc(\omega t)]\right) \\ &= J(t-t_1)J(t_1)\int_{-\infty}^{\infty} dx''\exp\left(i\frac{m\omega}{2}[(x'^2+x''^2)\cot(\omega(t-t_1)) \right. \\ &\quad \left. -2x'x''\csc(\omega(t-t_1))]\right)\cdot \exp\left(i\frac{m\omega}{2}[(x^2+x''^2)\cot(\omega t_1)-2xx'\csc(\omega t_1)]\right) \end{aligned} \tag{4.5.20}$$

其中用到(4.5.17)式的结果. 上面的等式应对任意的 x,x' 都成立，所以可令 $x=x'=0$，上式成为

$$\begin{aligned} \frac{J(t)}{J(t-t_1)J(t_1)} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx''\exp\left(i\frac{m\omega}{2}[\cot(\omega(t-t_1))+\cot(\omega t_1)]x''^2\right) \\ &= \left[\frac{2\pi i}{m\omega}\frac{1}{\cot\omega(t-t_1)+\cot\omega t_1}\right]^{\frac{1}{2}} \\ &= \left[\frac{2\pi i}{m\omega}\frac{\sin\omega(t-t_1)\sin\omega t_1}{\sin\omega t}\right]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{4.5.21}$$

比较上式左、右两方的三个变量 $t,t_1,t-t_1$ 分别对应的因子，可以得到

$$J(t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\sin\omega t}} = D_F(0,t;0,0) \tag{4.5.22}$$

有了(4.5.22)及(4.5.17)式后，谐振子的传播子最后可表示为

$$D_F(x',t;x,0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\sin\omega t}}\exp\left\{i\frac{m\omega}{2}[(x'^2+x^2)\cot\omega t-2xx'\csc\omega t]\right\} \tag{4.5.23}$$

4.5.3 用传播子方法解谐振子问题

现在以谐振子为例说明用传播子的办法同样可以求得它的所有能量本征值及定态波函数.

从传播子的表示

$$D_F(x',t;x,0) = \sum_n \varphi_n(x')\varphi_n^*(x)e^{-iE_nt} \tag{4.5.24}$$

出发,令上式中的 $x'=x$,并对 x 积分,有

$$\int D_F(x,t;x,0)\mathrm{d}x=\sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\varphi_n(x)\varphi_n(x)$$
$$=\sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t} \tag{4.5.25}$$

将谐振子传播子的表示式(4.5.23)代入上式,得

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xD_F(x,t;x,0)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\sin\omega t}}\exp\left[\mathrm{i}\frac{m\omega}{2}(2x^2\cot\omega t-2x^2\csc\omega t)\right]$$
$$=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\sin\omega t}}\exp\left(-\mathrm{i}m\omega x^2\tan\frac{\omega t}{2}\right)$$
$$=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\sin\omega t}}\cdot\sqrt{\frac{\pi}{\mathrm{i}m\omega\tan\frac{\omega t}{2}}}=\frac{1}{2\mathrm{i}\sin\frac{\omega t}{2}}$$
$$=\frac{1}{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}}}=\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega}{2}t}}{1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}$$
$$=\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}(2n+1)} \tag{4.5.26}$$

最后一个等式应用了等比级数的求和公式.将(4.5.26)与(4.5.25)式作比较,立即得到谐振子的能量本征值

$$E_n=\frac{\omega}{2}(2n+1) \tag{4.5.27}$$

为求定态波函数,仍从(4.5.23)式出发

$$D(x,t;x,0)=\sqrt{\frac{m\omega}{\pi}}\left(\frac{1}{2\mathrm{i}\sin\omega t}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left[-\mathrm{i}\frac{m\omega}{2}(2\cot\omega t-2\csc\omega t)x^2\right]$$
$$=\sqrt{\frac{m\omega}{\pi}}\left(\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(2n+1)\omega t}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left[-m\omega x^2\frac{\mathrm{i}\sin\frac{\omega t}{2}}{\cos\frac{\omega t}{2}}\right]$$
$$=\sqrt{\frac{m\omega}{\pi}}\left(\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(2n+1)\omega t}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-m\omega x^2\frac{1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}{1+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}\right)$$
$$=\sqrt{\frac{m\omega}{\pi}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}}(1+\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t}+\mathrm{e}^{-4\mathrm{i}\omega t}+\cdots)^{\frac{1}{2}}$$
$$\cdot\exp[-m\omega x^2(1-\mathrm{e}^{-\omega t})(1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t}-\cdots)]$$
$$=\left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}}+2m\omega x^2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{3\omega t}{2}}+\cdots)\mathrm{e}^{-m\omega x^2} \tag{4.5.28}$$

将(4.5.24)与(4.5.27)式作比较,可知

$$\varphi_0^*(x)\varphi_0(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}} = \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}} \mathrm{e}^{-m\omega x^2}$$

$$\varphi_1^*(x)\varphi_1(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{3\omega t}{2}} = \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{-m\omega x^2} 2m\omega x^2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{3\omega t}{2}}$$

$$\vdots$$

于是得

$$\begin{aligned} \varphi_0(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-\frac{m\omega x^2}{2}} \\ \varphi_1(x) &= \sqrt{2m\omega}\, x\varphi_0(x) \\ &\vdots \end{aligned} \tag{4.5.29}$$

于是求得了谐振子的所有定态波函数. 这一段讨论或许会让人们觉得用传播子的办法导出谐振子能谱及波函数是很简易的,无须作冗长的推导. 其实,主要推导已在算出传播子时进行过了,因此在工作的繁复程度上并无区别. 这里的讨论只是要表明,用传播子方法可以系统地在一个理论框架下讨论量子力学中的各种不同系统问题. 除此以外,如对原来的系统可以求出它的传播子,则在原来的系统上加上一个微扰时,还可以系统地求出其近似的传播子. 以谐振子系统为例,设系统受到的势作用为

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - f(x) \tag{4.5.30}$$

这时系统的传播子可以这样求得.

(a) 重复(4.4.4)到(4.4.6)式的步骤,即求出谐振子势加上外源项 $x(t)j(t)$ 的传播子 $D_F^j(x_f,t_f;x_i,t_i)$.

(b) 利用 D_F^j 可以求出 $D_F(x_f,t_f;x_i,t_i;f(x))$ 的展开式

$$\begin{aligned} &D_F(x_f,t_f;x_i,t_i;f(x)) \\ &= \int D[x]\exp\left\{\mathrm{i}\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t\left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2(t) - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2(t) + f(x(t))\right]\right\} \\ &= \exp\left[\mathrm{i}\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t f\left(-\mathrm{i}\frac{\delta}{\delta j(t)}\right)\right] D_F^j(x_f,t_f;x_i,t_i)\,|_{j=0} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\mathrm{i}^n}{n!}\left[\int_{t_i}^{t_f}\left(f\left(-\mathrm{i}\frac{\delta}{\delta j(t)}\right)\right)^n D_F^j(x_f,t_f;x_i,t_i)\right]\Big|_{j=0} \end{aligned} \tag{4.5.31}$$

于是可以根据精确程度的要求在右方的展开式中取确定的前几项算出(4.5.31)式的近似表示式,然后用它讨论系统的所有物理性质及演化规律. 只要一次求出 $D_F^j(x_f,t_f;x_i,t_i)$ 后,对于任何形式的 $f(x)$ 都一样直接用(4.5.31)式来计算. 从这里可以清楚地看出这一方法的优越性.

第 5 章　散 射 理 论

前几章主要围绕这样一个主题在进行，那就是量子理论和经典理论一样其中心内容是物理系统的演化规律，即动力学问题. 为了建立一个统一的、系统的动力学理论框架我们讨论了以传播子概念为核心的量子系统的路径积分形式，在上一章末并用谐振子系统为例说明了如何具体应用这一形式理论. 虽然我们不可能在本书中讨论各种复杂的物理系统及其演化规律，不过所有的复杂动力学问题不外是由一些最重要的基本动力学过程所组成，因此只需着重讨论这些基本的动力学过程，便可在它们的基础上去讨论更为繁杂的动力学问题. 这就是本章将要讨论的内容.

5.1　基 本 问 题

5.1.1　两粒子的散射

在前一章里讨论的是单个粒子在外势的作用下随时间变化的演化问题. 微观世界里还有另一类重要的动力学问题，那就是粒子与粒子之间的相互作用过程，特别是两粒子间的相互作用这样的微观世界中最基本的问题，即散射问题. 两粒子间相互作用的有效距离是很小的，所以可以认为它们在散射（产生有效的相互作用）前后是两个处于自由状态的粒子.

设散射前的 t 时刻粒子的状态为$|i\rangle$，散射后的 t'时刻粒子的末态为$|f\rangle$. 对于微观的散射过程来说，有限的 t 及 t'已可看做无限长的过去和无限长的后来，即$(t\to-\infty, t'\to+\infty)$，因此$|i\rangle$及$|f\rangle$都是不受作用的能量一定的定态.

$$
\begin{aligned}
|i\rangle &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_i t}\,|\varphi_i\rangle \\
|f\rangle &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_f t}\,|\varphi_f\rangle
\end{aligned}
\tag{5.1.1}
$$

$|\varphi_i\rangle$，$|\varphi_f\rangle$不含 t.

由前一章的讨论知，t 时刻系统居于态$|i\rangle$，t'时刻系统居于$|f\rangle$的几率幅是演化算符在$|i\rangle$，$|f\rangle$间的矩阵元

$$
\begin{aligned}
Amp_{f,i}(t',t) &\equiv \langle f\mid \hat{U}(t',t)\mid i\rangle \\
&= \mathrm{e}^{\mathrm{i}E_f t'}\langle\varphi_f\mid \hat{U}(t',t)\mid \varphi_i\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_i t}
\end{aligned}
\tag{5.1.2}
$$

除了两粒子系统的散射问题外，也可把这样的讨论应用于单粒子受到局域势

作用的散射问题中去. 如果单粒子受到的势作用仅限于空间中一个很小的范围，则粒子在远离该区域处可看做是自由的，当它接近该区域时才受到势的作用并改变其运动状态，然后在离开该区域较远后又回到自由的末态. 所以，散射问题从物理上讲既包含两粒子的相互作用散射也包含单粒子的势散射. 由力学的两体作用可通过引入质心坐标及相对坐标从而化为等效的单体问题来看，讨论单粒子的势散射实际上已在很大程度上反映了双体散射的主要内容.

从前面的分析可知，双体散射系统的哈密顿量可以分成两部分，$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$，其中 $\hat{H}_0$ 是自由的两粒子系的哈密顿量，$\hat{V}$ 代表两粒子的相互作用，$|i\rangle$ 及 $|f\rangle$ 是 $\hat{H}_0$ 的本征值分别为 E_i 及 E_f 的本征态矢. 而且，根据上一章的演化算符变换到频率空间的 $\hat{k}(\omega)$ 及它按 $\hat{V}$ 的无穷展开式，有

$$\hat{U}(t)\theta(t)=\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\hat{k}(\omega)$$

及
$$\hat{k}(\omega)=\hat{k}^{(0)}(\omega)+\hat{k}^{(0)}(\omega)(-\mathrm{i}\hat{V})\hat{k}^{(0)}(\omega)+\hat{k}^{(0)}(\omega)(-\mathrm{i}\hat{V})\hat{k}^{(0)}(\omega)(-\mathrm{i}\hat{V})\hat{k}^{(0)}(\omega)+\cdots$$

其中
$$\hat{k}^{(0)}(\omega)=\frac{\mathrm{i}}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}$$

因此(5.1.2)式可展成

$$\begin{aligned}
Amp_{f,i}(t',t)&=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_ft'-\mathrm{i}E_it_i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t'-t)}\langle\varphi_f\mid\hat{k}(\omega)\mid\varphi_i\rangle\\
&=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_ft'-\mathrm{i}E_it_i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t'-t)}\langle\varphi_f\mid\Big[\frac{\mathrm{i}}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\\
&\quad+\frac{\mathrm{i}}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}(-\mathrm{i}\hat{V})\frac{\mathrm{i}}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}+\cdots\Big]\mid\varphi_i\rangle\\
&=\langle\varphi_f\mid\varphi_i\rangle\cdot\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_f-\omega)t'-\mathrm{i}(E_i-\omega)t}}{\omega-E_i+\mathrm{i}\varepsilon}+\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_f-\omega)t'}}{\omega-E_f+\mathrm{i}\varepsilon}\\
&\quad F(\omega)\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_i-\omega)t}}{\omega-E_i+\mathrm{i}\varepsilon}
\end{aligned}\tag{5.1.3}$$

其中

$$F(\omega)=\langle\varphi_f\mid\hat{V}\mid\varphi_i\rangle+\langle\varphi_f\mid\hat{V}\frac{1}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\hat{V}\mid\varphi_i\rangle+\cdots\tag{5.1.4}$$

前面谈到散射问题感兴趣的是 $t'\to-\infty,t\to\infty$ 的极限情形. 为下面的内容作准备，先讨论一个积分

$$J=\lim_{t\to-\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega f(\omega)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}}{\omega+\mathrm{i}\varepsilon}\tag{5.1.5}$$

上述积分在 $t\to-\infty$ 时因子 $e^{i\omega t}$ 在 $\omega\neq0$ 的情形下随 ω 变化而剧烈变化，而 $f(\omega)$ 随 ω 的变化相对缓慢，于是在一个小 $\Delta\omega$ 范围内 $f(\omega)$ 几乎保持一定而 $e^{i\omega t}$ 却已经历了各种位相，因而相互抵消对积分无贡献. 只有 $\omega=0$ 的邻域才会有贡献，因此积分下的 $f(\omega)$ 等效于一个常数 $f(0)$，于是有

$$J\approx f(0)\lim_{t\to-\infty}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\frac{e^{i\omega t}}{\omega+i\varepsilon}\tag{5.1.6}$$

$f(0)$ 提出积分号后剩下的被积函数 $\dfrac{e^{i\omega t}}{\omega+i\varepsilon}$ 在 $t\to-\infty$ 时仍然只会在 $\omega\approx0$ 时才有贡献，所以它的行为 $\sim\delta(\omega)$. 不过，$\dfrac{e^{i\omega t}}{\omega+i\varepsilon}$ 和 $\delta(\omega)$ 间还有可能差一比例系数，即

$$\lim_{t\to-\infty}\frac{e^{i\omega t}}{\omega+i\varepsilon}=A\delta(\omega)$$

对上式两方作积分，复数积分沿实数轴加上下部半圆构成的回路进行，由留数定理得

$$\begin{aligned}A&=\int_{-\infty}^{\infty}A\delta(\omega)d\omega=\lim_{\substack{t\to-\infty\\(\varepsilon\to0)}}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\frac{e^{i\omega t}}{\omega+i\varepsilon}\\&=\lim_{t\to-\infty}\lim_{\varepsilon\to0}\oint d\omega\frac{e^{i\omega t}}{\omega+i\varepsilon}\\&=\lim_{t\to-\infty}\lim_{\varepsilon\to0}(-2\pi i)e^{i(-i\varepsilon)t}\\&=-2\pi i\end{aligned}\tag{5.1.7}$$

所以在积分号下有

$$\lim_{t\to-\infty}\frac{e^{i\omega t}}{\omega+i\varepsilon}\to-2\pi i\delta(\omega)\tag{5.1.8}$$

把(5.1.8)式应用到(5.1.3)式中去，写成

$$\begin{aligned}\lim_{\substack{t'\to\infty\\t\to-\infty}}Amp_{f,i}(t',t)&=\lim_{t'\to\infty}i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{i(E_f-\omega)t'}[-2\pi i\delta(\omega-E_i)]\langle\varphi_f\mid\varphi_i\rangle\\&\quad+\lim_{t'\to\infty}i\int\frac{d\omega}{2\pi}\frac{e^{i(E_f-\omega)t'}}{\omega-E_f+i\varepsilon}[-2\pi i\delta(\omega-E_i)]F(\omega)\\&=\lim_{t'\to\infty}\left[e^{i(E_f-E_i)t'}\langle\varphi_f\mid\varphi_i\rangle+\frac{e^{i(E_f-E_i)t'}}{E_i-E_f+i\varepsilon}F(E_i)\right]\end{aligned}\tag{5.1.9}$$

由于 $|\varphi_i\rangle$，$|\varphi_f\rangle$ 是 $\hat{H}_0$ 的本征态矢，故有正交性

$$\langle\varphi_f\mid\varphi_i\rangle=\delta_{fi}\tag{5.1.10}$$

同时(5.1.9)式中第二项里的因子 $\dfrac{e^{i(E_f-E_i)t'}}{E_i-E_f+i\varepsilon}$ 也可用(5.1.8)式的代换，即在上述的论证中将 ω 换成 E_i-E_f，便可得到

$$\lim_{t'\to\infty}\frac{e^{-i(E_f-E_i)t'}}{E_i-E_f+i\varepsilon}=\lim_{t'\to\infty}\frac{e^{-i(E_f-E_i)t'}}{E_i-E_f+i\varepsilon}\to -2\pi i\delta(E_i-E_f) \tag{5.1.11}$$

所以(5.1.3)式最后写成

$$\lim_{\substack{t'\to\infty\\ t\to-\infty}} Amp_{f,i}(t',t)=\delta_{fi}-2\pi i\delta(E_f-E_i)F(E_i) \tag{5.1.12}$$

这样一来,散射问题便化为求 $F(E_i)$的问题了.

5.1.2 *S* 矩阵

上面已经谈过对于散射问题关心的是 t,t'趋于$-\infty$及$+\infty$情况下的散射几率幅,为此定义 S 矩阵元如下

$$\langle f\mid S\mid i\rangle=\lim_{\substack{t'\to\infty\\ t\to-\infty}}\langle\varphi_f\mid\hat{U}(t',t)\mid\varphi_i\rangle \tag{5.1.13a}$$

并可将(5.1.12)式改写为

$$\langle f\mid S\mid i\rangle=\delta_{fi}-2\pi i\delta(E_f-E_i)F(E_i) \tag{5.1.13b}$$

如果再定义一个 T 算符如下:

$$\langle\varphi_f\mid T\mid\varphi_i\rangle=F(E_i) \tag{5.1.14}$$

则 S 算符就可表示为

$$S=1-2\pi i\delta(E_f-E_i)T \tag{5.1.15}$$

将 $F(a)$的表示式(5.1.4)中的变量 ω 取为 $\omega=E_i$,得 $F(E_i)$的表示式如下

$$F(E_i)=\langle\varphi_f|\hat{V}|\varphi_i\rangle+\langle\varphi_f|\hat{V}\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+i\varepsilon}\hat{V}|\varphi_i\rangle+\cdots \tag{5.1.16}$$

也可将上式写成

$$F(E_i)=\langle\varphi_f\mid\hat{V}\mid\psi_i^{(+)}\rangle \tag{5.1.17}$$

其中散射态$|\psi_i\rangle$满足如下的方程

$$\begin{aligned}|\psi_i^{(+)}\rangle&=|\varphi_i\rangle+\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+i\varepsilon}\hat{V}\mid\varphi_i\rangle+\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+i\varepsilon}\hat{V}\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+i\varepsilon}\\&\quad\hat{V}\mid\varphi_i\rangle+\cdots\\&=|\varphi_i\rangle+\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+i\varepsilon}\hat{V}\mid\psi_i^{(+)}\rangle\end{aligned} \tag{5.1.18}$$

至此我们把散射问题从求 $Amp_{f,i}$转化为求 S 矩阵(算符)再到求 T 算符,进而转化为求$F(E_i)$,最后转化为求散射态$|\psi_i^+\rangle$.

5.1.3 $|\psi_i^{(+)}\rangle$的求解

首先证明$|\psi_i^{(+)}\rangle$满足一个本征值与$|\varphi_i\rangle$的本征值 E_i 相同的定态方程. 已知$|\varphi_i\rangle$满足

$$\hat{H}_0 \mid \varphi_i \rangle = E_i \mid \varphi_i \rangle \tag{5.1.19}$$

则

$$\begin{aligned}(\hat{H}_0 + \hat{V} - E_i) \mid \psi_i^{(+)} \rangle &= (\hat{H}_0 - E_i)\left[\mid \varphi_i \rangle + \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + \mathrm{i}\varepsilon} \hat{V} \mid \psi_i^{(+)} \rangle \right] + \hat{V} \mid \psi_i^{(+)} \rangle \\ &= 0 - \hat{V} \mid \psi_i^{(+)} \rangle + \hat{V} \mid \psi_i^{(+)} \rangle = 0 \end{aligned} \tag{5.1.20}$$

可见$|\psi_i^{(+)}\rangle$相应的本征值的确也是 E_i，当然它满足的定态方程是含 $\hat{V}$ 的方程.

为了讨论得更加具体一些，把求解散射态$|\psi_i^{(+)}\rangle$的问题化为等价地求散射态的波函数问题

$$\begin{aligned}\psi_i^{(+)}(\boldsymbol{r}) &= \langle \boldsymbol{r} \mid \psi_i^{(+)} \rangle \\ &= \langle \boldsymbol{r} \mid \varphi_i \rangle + \int \mathrm{d}^3 r' \langle \boldsymbol{r} \mid \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + \mathrm{i}\varepsilon} \hat{V} \mid \boldsymbol{r}' \rangle \langle \boldsymbol{r}' \mid \psi_i^{(+)} \rangle \\ &= \langle \boldsymbol{r} \mid \varphi_i \rangle + \int \mathrm{d}^3 r' \langle \boldsymbol{r} \mid \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + \mathrm{i}\varepsilon} \mid \boldsymbol{r}' \rangle V(\boldsymbol{r}') \psi_i^{(+)}(\boldsymbol{r}') \end{aligned} \tag{5.1.21}$$

在单粒子的势散射情形下

$$\langle \boldsymbol{r} \mid \varphi_i \rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_i \cdot \boldsymbol{r}}$$

所以这时求 $\psi_i^{(+)}(\boldsymbol{r})$的问题化为先求(5.1.21)式积分中的积分核

$$\langle \boldsymbol{r} \mid \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + \mathrm{i}\varepsilon} \mid \boldsymbol{r}' \rangle \equiv K^{(0)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \tag{5.1.22}$$

因为有了积分核 $K^{(0)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$后就可以去解(5.1.21)式的积分方程了. 积分核的计算如下

$$\begin{aligned}K^{(0)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') &= \langle \boldsymbol{r} \mid \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + \mathrm{i}\varepsilon} \mid \boldsymbol{r}' \rangle \\ &= \langle \boldsymbol{r} \mid \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + \mathrm{i}\varepsilon} \mid \boldsymbol{p} \rangle \langle \boldsymbol{p} \mid \boldsymbol{r}' \rangle \rangle \\ &= \int \frac{\mathrm{d}^3 p \langle \boldsymbol{r} \mid \boldsymbol{p} \rangle}{(2\pi)^3} \frac{1}{E_i - \frac{p^2}{2m} + \mathrm{i}\varepsilon} \langle \boldsymbol{p} \mid \boldsymbol{r}' \rangle \\ &= \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} \frac{1}{E_i - \frac{p^2}{2m} + \mathrm{i}\varepsilon} \end{aligned} \tag{5.1.23}$$

引入 p_i

$$\frac{p_i^2}{2m} \equiv E_i$$

以及记

$$R \equiv | \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}' |$$

先把(5.1.23)式中的角度变量积分，取 $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'$ 的方向为 z 方向，则

$$K^{(0)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\int\frac{p^2\mathrm{d}p\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}pR\cos\theta}\frac{2m}{p_i^2-p^2+\mathrm{i}\varepsilon}$$

$$=\frac{2m}{(2\pi)^2\mathrm{i}R}\int_0^\infty\mathrm{d}pp\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pR}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}pR}}{p_i^2-p^2+\mathrm{i}\varepsilon}\tag{5.1.24}$$

上式第一项可改写为

$$\int_0^\infty p\mathrm{d}p\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pR}}{p_i^2-p^2+\mathrm{i}\varepsilon}=\int_0^{-\infty}p'\mathrm{d}p'\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'R}}{p_i^2-p'+\mathrm{i}\varepsilon}=-\int_{-\infty}^0p'\mathrm{d}p'\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'R}}{p_i^2-p'+\mathrm{i}\varepsilon}$$

这样(5.1.24)式中的两项可以合成一项而积分限扩大到$(-\infty,\infty)$

$$K^{(0)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\frac{-2m}{(2\pi)^2\mathrm{i}R}\int_{-\infty}^\infty\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}pR}}{p_i^2-p^2+\mathrm{i}\varepsilon}p\mathrm{d}p\qquad(\text{加上大半圆})$$

$$=\frac{-2m}{(2\pi)^2\mathrm{i}R}\oint\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}pR}}{(p_i+p+\mathrm{i}\varepsilon)(p_i-p+\mathrm{i}\varepsilon)}p\mathrm{d}p\quad(\text{极点 }p=p_i+\mathrm{i}\varepsilon)$$

$$=\frac{-2m}{(2\pi)^2\mathrm{i}R}\cdot2\pi\mathrm{i}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_iR}}{2p_i}p_i=-\frac{m}{2\pi R}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_iR}\tag{5.1.25}$$

将(5.1.25)式代回(5.1.21)式得

$$\psi_i^{(+)}(\boldsymbol{r})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{r}}-\frac{m}{2\pi}\int\mathrm{d}^3r'\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_iR}}{R}V(\boldsymbol{r}')\psi_i^{(+)}(\boldsymbol{r}')\tag{5.1.26}$$

虽然已可由(5.1.26)式去解散射的一般性问题，不过从实际的角度看人们感兴趣的是这样的情形：由于实验测量仪器与微观粒子被散射区域之间的距离 $\boldsymbol{r}$ 远大于 $V(\boldsymbol{r}')$ 显著不为零的 $\boldsymbol{r}'$ 的范围，实际要求的是 $|\boldsymbol{r}|\to\infty$ 情形时的 $\psi_i^{(+)}(\boldsymbol{r})$，这时

$$R=\sqrt{r^2-2\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}'+r'}\approx r\sqrt{1-2\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}'/r^2}\approx r-\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{r}'\tag{5.1.27}$$

故有

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_iR}\approx\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_ir}\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_f\cdot\boldsymbol{r}'}\tag{5.1.28}$$

其中 $\boldsymbol{p}_f$ 定义为

$$\boldsymbol{p}_f\equiv p_i\hat{\boldsymbol{r}}\tag{5.1.29}$$

于是在 $|\boldsymbol{r}|\to\infty$ 的情形下.(5.1.26)式近似成为

$$\psi_i^{(+)}(\boldsymbol{r})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{r}}+\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_ir}\left(-\frac{m}{2\pi}\int\mathrm{d}^3r'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_f\cdot\boldsymbol{r}'}V(\boldsymbol{r}')\psi_i^{(+)}(\boldsymbol{r}')\right)$$

$$=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{r}}+\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_ir}\left(-\frac{m}{2\pi}\langle\varphi_f\mid\hat{V}\mid\psi_i^{(+)}\rangle\right)$$

$$=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{r}}+\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_ir}f_{p_i}(\theta,\varphi)\tag{5.1.30}$$

上式中用到关系 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_f\cdot\boldsymbol{r}'}=\langle\varphi_f|\boldsymbol{r}\rangle$，即在很远处散的粒子的状态 $|\varphi_f\rangle$ 又是自由的平面波状态，此外

$$f_{p_i}(\theta,\varphi)\equiv-\frac{m}{2\pi}\langle\varphi_f\mid\hat{V}\mid\psi_i^{(+)}\rangle=-\frac{m}{2\pi}\boldsymbol{F}(E_i)\tag{5.1.31}$$

在得到(5.1.30)式后可小结如下：

(a) 粒子($t=-\infty$)以一个动量为 $\boldsymbol{p}_i$ 的平面波向作用势的有效区域入射.

(b) 粒子受作用势的影响后在远离势的有效区域处($t'=\infty$)除原有的 $e^{i\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{r}}$ 平面波部分外产生了另一部分的散射波,它以球面波 $\frac{1}{r}e^{ip_i r}$ 的形式向四周散射.

(c) 散射波在不同的方向(θ,φ)的几率幅是

$$f_{p_i}(\theta,\varphi)\sim F(E_i) \tag{5.1.32}$$

由上式可以看出,一开始讨论散射问题时引入的关联量 $F(E_i)$ 的物理含义就是散射波在各个方向上的几率幅.

5.2 散射的波包机制

5.2.1 问题的提出

上节的讨论留下了一个疑问,那就是把入射和散射的粒子状态表示为动量一定的平面波的做法是否合理.如果严格地是平面波,则任何时刻它都会弥漫于全空间.不会像前面讨论那样 $t=-\infty$ 在很远处,$t'=\infty$ 时离开作用区再散射到很远处去.事实上真实的实验是一束粒子流入射过来,粒子是处在波包形式的状态中,即它的几率分布在一个有限的区域里. $t=0$ 时波包的中心位于 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_0$ 处,以 $\boldsymbol{V}_i=\frac{\boldsymbol{K}_0}{m}$ 的速度向靶运动(见图5.1).既然是一个波包,它就应当是以 $\boldsymbol{K}=\boldsymbol{K}_0$ 为中心按一定动量分布 $\Phi(\boldsymbol{k})$ 的各种平面波的叠加.

$$\psi_i(\boldsymbol{r})=\sum_{\boldsymbol{k}}\Phi(\boldsymbol{k})e^{-i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)-iE_k t}$$

注意:波包是在以 $\boldsymbol{k}_0$ 为中心的一个窄的 $\boldsymbol{k}_0-\Delta\boldsymbol{k}\rightarrow\boldsymbol{k}_0+\Delta\boldsymbol{k}$ 上的动量分布.这样的情形从微观看它在位形空间可看做是一个宽的分布,而在讨论散射时与($t\rightarrow\infty$) $r\rightarrow\infty$ 相比之下波包仍可从宏观上看做是集中于中心的一点.

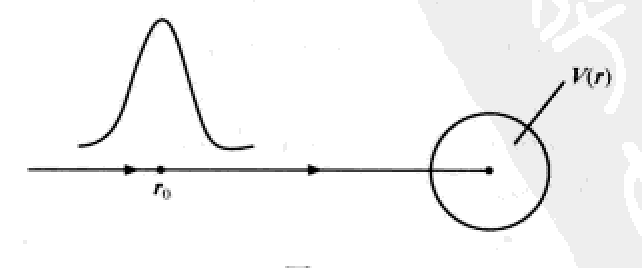


图5.1

5.2.2 波包散射

我们已质疑前面的形式上用平面波讨论散射的合理性,现在来考虑真实的波

包散射.波包如上所述是对应各种 $\boldsymbol{k}$ 的平面波函数的叠加,应将(5.1.30)式的散射态波函数的方程改写为波包形式的方程.

$$\psi^{(+)}(\boldsymbol{r},t)=\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\Phi(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)-\mathrm{i}E_kt}\psi^{(+)}(\boldsymbol{r})$$

$$\underset{r\to\infty}{\longrightarrow}\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\Phi(\boldsymbol{k})\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)-\mathrm{i}E_kt}+\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_0-\mathrm{i}E_kt}f_k(\theta,\varphi)\right]\tag{5.2.1}$$

其中 $E_k=\frac{k^2}{2m}$.上式源自对每一平面波都有上节导出的结果,不过要注意的是在对不同的 $\boldsymbol{k}$ 叠加时应当把振幅 $\Phi(\boldsymbol{k})$ 连同相应的相因子一起考虑.

(a) (5.2.1)式中的第一项对应于原始的波包,即未受散射的部分.随着时间的演化,波包在任一 t 时的中心就是振幅的最大处.在那里不同的 $\boldsymbol{k}$ 一定是相位差别最小,更确切地说在那里相位与 $\boldsymbol{k}$ 无关使得相互抵消最小,即

$$\nabla_k\left[\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_0)-\frac{k^2}{2m}t\right]=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_0-\frac{\boldsymbol{k}}{m}t=0$$

由于波包是以 $\boldsymbol{k}_0$ 为中心,以 $2\Delta k$ 为变化范围的平面波叠加.所以可近似取作 $\boldsymbol{k}\approx\boldsymbol{k}_0$,作这样的近似后,根据上式便知波包在 t 时刻的中心 $\boldsymbol{r}_1$ 为

$$\boldsymbol{r}_1\approx\boldsymbol{r}_0+\frac{\boldsymbol{k}_0}{m}t\tag{5.2.2}$$

因此得出结论,波包(中心)以$\frac{\boldsymbol{k}_0}{m}$的速度行进.

(b) 未散射的(5.2.1)式的第一部分为

$$\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\Phi(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)-\mathrm{i}\frac{k^2}{2m}t}$$

$$\approx\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)-\mathrm{i}\frac{k_0^2}{2m}t}\int\frac{\mathrm{d}^3\Delta k}{(2\pi)^3}\Phi(\boldsymbol{k}_0+\Delta\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Delta\boldsymbol{k}\cdot\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0-\frac{\boldsymbol{k}_0}{m}t\right)}\tag{5.2.3}$$

在上面的近似中已忽略掉$(\boldsymbol{k}_0+\Delta\boldsymbol{k})=k_0+2\boldsymbol{k}_0\cdot\Delta\boldsymbol{k}+(\Delta k)^2$ 中的二阶小量$(\Delta k)^2$.

这样(5.2.3)式中的第二部分就是原来的没有变形的波包.如果不能略掉 Δk^2 项,Δk^2 项就会使波包扩散.(5.2.3)式的第一部分就是一个动量为 $\boldsymbol{k}_0$ 的平面波的相因子.

因此在散射问题中波包可看做宏观小时,即可看做是一点时,则未散射部分就可看做始终保持平面波的形式.

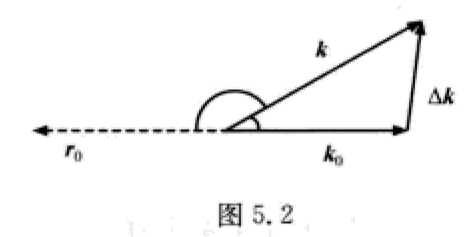


图 5.2

(c) 考察(5.2.1)式的第二项散射部分,如图 5.2 所示.

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_0=-kr_0\cos\varphi$$
$$=-kr_0\left(1+o\left(\frac{\Delta k}{k}\right)^2+\cdots\right)\tag{5.2.4a}$$

将该部分的相因子

$$kr-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_0-\frac{k^2}{2m}t\approx k_0r-k_0r_0-\frac{k_0{}^2}{2m}t+\Delta k\left(r-r_0-\frac{k_0}{m}t\right)+o(\Delta k^2) \tag{5.2.4b}$$

代入(5.2.1)式,得散射部分为

$$\psi_s^{(+)}\approx\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0(r-r_0)-\mathrm{i}\frac{k_0}{2m}t}f_{k_0}(\theta,\varphi)\cdot\int\frac{\mathrm{d}^3\Delta k}{(2\pi)^3}\Phi(\boldsymbol{k}_0+\Delta\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Delta k\left(r-r_0-\frac{k_0}{m}t\right)} \tag{5.2.5}$$

(5.2.5)式的第二部分是波包部分,宏观上可看做一点时就回到(5.2.1)式的散射波形式.

前面已讲过在 $t=0$ 时波包中心在 $\boldsymbol{r}_0$ 处. 只有到了 t_c 时刻波包才到达作用的有效地点 r_c(力心).

$$t_c=\frac{r_c-r_0}{k_0/m} \tag{5.2.6}$$

因此只有 $t>t_c$ 以后散射波才存在.

通过这一节的讨论知道,尽管真实的散射问题是波包在力心上的散射,但只要波包中的动量分布很窄,其波包就可看做宽度是微观大宏观小的. 在散射实验中由于考虑的 r 很大,这种波包在宏观上的确可看做为一点,因此原来以平面波处理的办法仍然有效.

5.3　散射截面

在上一节中已讨论过,尽管真实的散射是波包的散射,但仍可用平面波去代替它作讨论及计算,因此下面的讨论仍沿用平面波散射的形式. 为了以后的讨论需要引入一些物理量.

(a) 流强. 入射波的流强是这样定义的:在垂直于波传播方向上有一个小面积 $\Delta A(\Delta A=\Delta x\Delta y)$,单位时间内入射波传播了 Δz 的距离,在单位时间内在 $\Delta V=\Delta z\cdot\Delta A=\Delta z\Delta x\Delta y$ 内的几率 $\rho=|\psi|^2\Delta z\Delta x\Delta y$ 会全部通过右方截面(见图 5.3),则有

$$I_0=\frac{\rho}{\Delta A}=|\psi|^2\Delta z \tag{5.3.1}$$

换句话说,流强 I_0 就是单位时间通过单位截面的几率(或粒子数). 如 ψ 是平面波 $N\mathrm{e}^{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$,则 $I_0=N^2\Delta z$.

(b) 微分散射截面. 入射波入射到力心后,散射到各个方向,如图 5.4 所示. 在单位时间内散射到以(θ,φ)方向为轴的小立体角元 $\mathrm{d}\Omega$ 内的几率被 $\mathrm{d}\Omega$ 除得到的值再除以流强 I_0,就叫做散射到(θ,φ)方向上的微分散射截面 $\mathrm{d}\sigma$.

$$d\sigma = \frac{\text{单位时间内散射到立体角元 } d\Omega \text{ 的几率}}{d\Omega} / I_0 \tag{5.3.2}$$

微分散射截面 $d\sigma$ 可以形象地看做是在与传播方向垂直的平面上单位面积内有多大的一小片面积的几率被散射到(θ,φ)方向的单位立体角内. 微分散射截面反映探测器上直接接收到的几率(或粒子数).

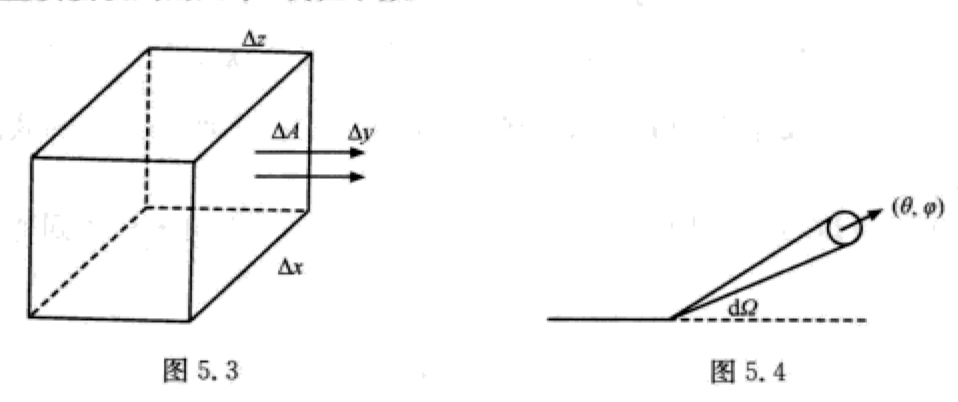


图 5.3　　图 5.4

(c) 按照(5.1.30)式散射波部分为$\frac{N}{r}e^{ip_f r}f_{k_0}(\theta,\varphi)$,因此在单位时间内沿$(\theta,\varphi)$方向的球面波传播了 Δr 的距离且散射到 $d\Omega$ 内的几率为

$$\begin{aligned}
&|Ne^{ik_f\cdot r}|^2\frac{|f_{k_0}(\theta,\varphi)|^2}{r^2}r^2\Delta r d\Omega \\
&= N^2|e^{ik_f\cdot r}|^2\Delta r|f_{k_0}(\theta,\varphi)|^2 d\Omega \\
&= I_0|f_{k_0}(\theta,\varphi)|^2 d\Omega
\end{aligned}$$

故

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{I_0|f_{k_0}(\theta,\varphi)|^2 d\Omega}{I_0 d\Omega} = |f_{k_0}(\theta,\varphi)|^2 \tag{5.3.3}$$

这样一来(5.3.3)式就把理论计算量 $f(\theta,\varphi)$和实验的观测量$\frac{d\sigma}{d\Omega}$联系起来了.

5.4 跃迁几率幅的微扰展开

5.4.1 微扰展开

对于实际的物理系统,散射问题也常常只能作近似计算,因此有必要再回到微扰展开的讨论. 从一开始讨论散射问题时我们就指出,散射讨论的是 $t\to-\infty$时系统处于状态$|i\rangle$到 $t\to\infty$时系统到$|f\rangle$的几率幅

$$\lim_{\substack{t'\to\infty \\ t\to-\infty}} Amp_{f,i}(t',t) = \delta_{fi} - 2\pi i\delta(E_f - E_i)F(E_i)$$

即等价于求

$$F(E_i)=\langle f\mid T\mid i\rangle=T_{fi}=\langle f\mid\hat{V}\mid\psi_i^{(+)}\rangle$$

其中$|\psi_i^{(+)}\rangle$按微扰展开后可写成

$$\begin{aligned}T_{fi}&=\langle f\mid\hat{V}\mid\psi_i^{(+)}\rangle\\&=\langle f\mid\hat{V}\mid i\rangle+\langle f\mid\hat{V}\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\hat{V}\mid i\rangle\\&\quad+\langle f\mid\hat{V}\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\hat{V}\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\hat{V}\mid i\rangle+\cdots\end{aligned}\tag{5.4.1}$$

上式中的各个项可以用以下的费曼图来描绘.

(a) 第一项

$$\langle f\mid\hat{V}\mid i\rangle=V_{fi}$$

其费曼图如图 5.5 所示.

(b) 第二项

$$\begin{aligned}\langle f\mid\hat{V}\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\hat{V}\mid i\rangle&=\sum_k\langle f\mid\hat{V}\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\mid k\rangle\langle k\mid\hat{V}\mid i\rangle\\&=\sum_k V_{f_k}\frac{1}{E_i-E_k+\mathrm{i}\varepsilon}V_{ki}\end{aligned}$$

其费曼图如图 5.6 所示.

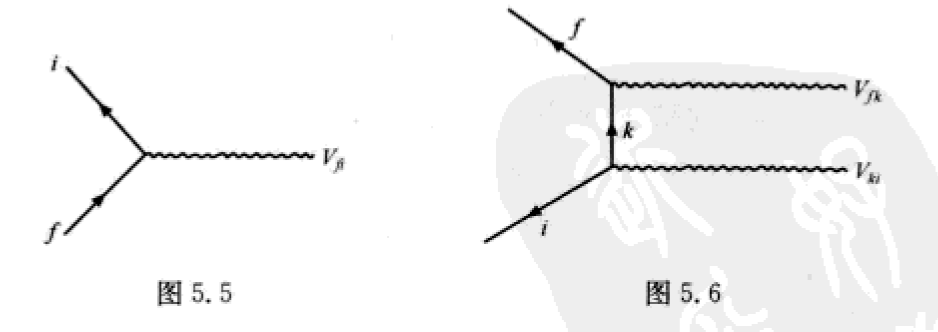


图 5.5 图 5.6

(c) 第三项

$$\begin{aligned}&\langle f\mid\hat{V}\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\hat{V}\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\hat{V}\mid i\rangle\\&=\sum_{kl}\langle f\mid\hat{V}\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\mid l\rangle\langle l\mid\hat{V}\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\mid k\rangle\langle k\mid\hat{V}\mid i\rangle\\&=\sum_{kl}V_{fl}\frac{1}{E_i-E_l+\mathrm{i}\varepsilon}V_{lk}\frac{1}{E_i-E_k+\mathrm{i}\varepsilon}V_{ki}\end{aligned}$$

其费曼图如图 5.7 所示.

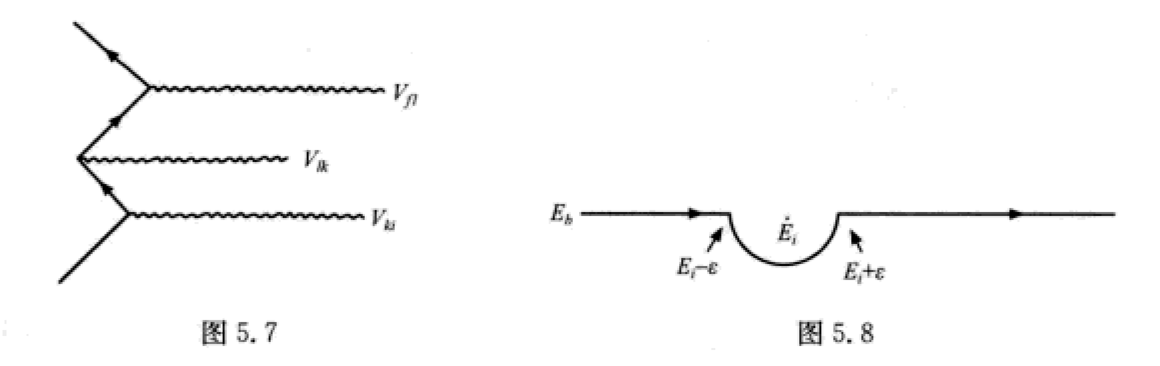


图 5.7　　　　图 5.8

图形的规则是：初态用↗表示，末态用↖表示，势顶角 V_{fi} 用～～～表示，中间实线↗代表传播子 $\sum\limits_k \dfrac{1}{E_i - E_k + \mathrm{i}\varepsilon}$.

传播子分母上的 iε 是有实质作用的，例如：

$$
\begin{aligned}
&\sum_b \frac{f(E_b)}{E_i - E_b + \mathrm{i}\varepsilon} \\
&\to \int_{E_b}^{\infty} - \mathrm{d}E_b \frac{f(E_b)}{E_b - E_i + \mathrm{i}\varepsilon} \\
&= -\left[\int_{E_b}^{E_i-\varepsilon} + \int_{E_i+\varepsilon}^{\infty}\right]\mathrm{d}E_b \frac{f(E_b)}{E_b - E_i} - \int_c \mathrm{d}E_b \frac{f(E_b)}{E_b - E_i}
\end{aligned}
\tag{5.4.2}
$$

$\varepsilon \to 0$ 时，上式的前两个积分是主值积分

$$
\int_{E_b}^{\infty} \mathrm{d}E_b P\left(\frac{f(E_b)}{E_b - E_i}\right) \tag{5.4.3}
$$

对于第三项的下半圆上的积分，因为在下半圆上 E_b 可表示为

$$
E_b - E_i = \eta \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta} \to \mathrm{d}E_b = \mathrm{i}\eta \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\mathrm{d}\theta \tag{5.4.4}
$$

代入后有

$$
\begin{aligned}
-\lim_{\eta\to 0}\int_c \mathrm{d}E_b \frac{f(E_b)}{E_b - E_i} &= \lim_{\eta\to 0} - f(E_i)\int_{\pi}^{2\pi} \frac{\mathrm{i}\eta \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\mathrm{d}\theta}{\eta \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}} \\
&= -\mathrm{i}\pi f(E_i) = -\mathrm{i}\pi \int_{E_b \min}^{\infty} \mathrm{d}E_b f(E_b)\delta(E_b - E_i)
\end{aligned}
\tag{5.4.5}
$$

因此，最后有

$$
-\sum_b f(E_b)\frac{1}{E_b - E_i + \mathrm{i}\varepsilon} = -\sum_b f(E_b)\left[P\frac{1}{E_b - E_i} + \mathrm{i}\pi\delta(E_b - E_i)\right] \tag{5.4.6}
$$

显然由于分母中的 iε 存在才会有如此结果.

5.4.2 光学定理

前面关于散射的讨论也许会留下这样一个疑问,本来入射时只有平面波,经势作用后原来的平面波保持不变的同时又加上了散射波部分,这样总几率会守恒吗?答案是总几率是守恒的,这是因为平面波和散射的球面波实际上它们之间是有干涉的.入射的平面波和散射的球面波在向前的方向上会有所抵消,从而保证了总几率守恒.为看清这种散射波的向前部分与平面波间干涉的存在,下面讨论由这种机制导出的光学定理.

首先看一看表征散射的散射算符 S 应当具有什么样的性质才能保证散射前后系统的总几率不变.假定系统的初始状态 $|a\rangle$ 是归一的,即

$$\langle a \mid a\rangle = 1 \tag{5.4.7}$$

散射时从 $|a\rangle$ 到某一终态的几率幅是

$$Amp_{ba} = \lim_{\substack{t'\to\infty \\ t\to-\infty}} \langle b \mid \hat{U}(t',t) \mid a\rangle = \langle b \mid S \mid a\rangle$$

如果散射时几率保持不变,则把所有可能的终态的几率加起来一定还是归一的,即

$$\begin{aligned} 1 &= \lim_{\substack{t'\to\infty \\ t\to-\infty}} \sum_b \mid \langle b \mid \hat{U}(t',t) \mid a\rangle \mid^2 = \sum_b \mid \langle b \mid S \mid a\rangle \mid^2 \\ &= \sum_b \langle a \mid S^+ \mid b\rangle\langle b \mid S \mid a\rangle \\ &= \langle a \mid S^+ S \mid a\rangle \end{aligned} \tag{5.4.8}$$

由于 $|a\rangle$ 是任意的态,上式要满足必然有

$$S^+ S = 1 \tag{5.4.9}$$

类似于上面的考虑,反过来把散射到某一确定的、归一的终态上的所有初态 $|a\rangle$ 对应的几率加起来,如几率保持不变,则其和也应是1.

因此应有

$$\begin{aligned} \sum_a \mid \langle b \mid S \mid a\rangle \mid^2 &= \sum_a \langle b \mid S \mid a\rangle\langle a \mid S^+ \mid b\rangle \\ &= \langle b \mid SS^+ \mid b\rangle = 1 \end{aligned} \tag{5.4.10}$$

得

$$SS^+ = 1 \tag{5.4.11}$$

综合以上的讨论可得出这样的重要结论:几率守恒要求 S 算符是幺正算符,或 S 矩阵是幺正矩阵.

下面我们利用 S 矩阵的幺正性来推导光学定理.利用 $S^+ S=1$ 可以导出下面的等式.记 $|\boldsymbol{p}\rangle$ 为动量一定的态矢

$$(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{p}_c-\boldsymbol{p}_a)=\langle \boldsymbol{p}_c \mid \boldsymbol{p}_a\rangle=\langle \boldsymbol{p}_c \mid S^+ S \mid \boldsymbol{p}_a\rangle$$
$$=\int \frac{d^3 p_b}{(2\pi)^3}\langle \boldsymbol{p}_c \mid S^+ \mid \boldsymbol{p}_b\rangle\langle \boldsymbol{p}_b \mid S \mid \boldsymbol{p}_a\rangle \qquad (5.4.12)$$

回顾一下在开始讨论散射时的几个基本物理量之间的关系

$$\langle f \mid S \mid i\rangle=\langle f \mid i\rangle-2\pi i\delta(E_f-E_i)\langle f \mid T \mid i\rangle$$
$$=\langle f \mid i\rangle-2\pi i\delta(E_f-E_i)F(E_i)$$
$$=\langle f \mid i\rangle-2\pi i\delta(E_f-E_i)\langle \Phi_f \mid \hat{V} \mid \psi_i^{(+)}\rangle \qquad (5.4.13)$$

现在把上述等式中的$|i\rangle$,$|f\rangle$取作动量态

$$\langle \boldsymbol{p}_b \mid S \mid \boldsymbol{p}_a\rangle=\langle \boldsymbol{p}_b \mid \boldsymbol{p}_a\rangle-2\pi i\delta(E_b-E_a)\langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_a^{(+)}\rangle$$
$$=(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{p}_b-\boldsymbol{p}_a)-2\pi i\delta(E_b-E_a)\langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_a^{(+)}\rangle$$
$$\langle \boldsymbol{p}_c \mid S^+ \mid \boldsymbol{p}_b\rangle=\langle \boldsymbol{p}_b \mid S \mid \boldsymbol{p}_c\rangle^*$$
$$=(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{p}_c-\boldsymbol{p}_b)+2\pi i\delta(E_c-E_b)\langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_c^{(+)}\rangle^* \qquad (5.4.14)$$

把(5.4.14)式代入(5.4.12)式得

$$(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{p}_c-\boldsymbol{p}_a)$$
$$=\int \frac{d^3 p_b}{(2\pi)^3}\left[(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{p}_c-\boldsymbol{p}_b)+2\pi i\delta(E_c-E_b)\langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_c^{(+)}\rangle^*\right]$$
$$\cdot\left[(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{p}_b-\boldsymbol{p}_a)-2\pi i\delta(E_b-E_a)\langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_a^{(+)}\rangle\right]$$
$$=(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{p}_c-\boldsymbol{p}_a)+\int \frac{d^3 p_b}{(2\pi)^3}\left[(2\pi)^4 i\delta^3(\boldsymbol{p}_b-\boldsymbol{p}_a)\delta(E_c-E_b)\langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_c^{(+)}\rangle^*\right.$$
$$\left.-(2\pi)^4 i\delta^3(\boldsymbol{p}_c-\boldsymbol{p}_b)\delta(E_b-E_a)\langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_a^{(+)}\rangle\right]$$
$$+\int \frac{d^3 p_b}{(2\pi)^3}2\pi\delta(E_a-E_b)2\pi\delta(E_b-E_c)\langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_c^{(+)}\rangle^*\langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_a^{(+)}\rangle \qquad (5.4.15)$$

消去上式左、右方的第一项,此外将右方最后一项中的$\delta(E_a-E_b)\delta(E_b-E_c)$改写成$\delta(E_c-E_a)\delta(E_b-E_c)$,第二项的$\delta^3(\boldsymbol{p}_c-\boldsymbol{p}_b)\delta(E_b-E_a)$改写成$\delta^3(\boldsymbol{p}_c-\boldsymbol{p}_b)\delta(E_c-E_a)$,然后把右方剩下三项中的共同因子$2\pi\delta(E_c-E_a)$提出并消去,第二项及第三项对$\boldsymbol{p}_b$的积分利用$\delta^3(\boldsymbol{p}_b-\boldsymbol{p}_a)$及$\delta^3(\boldsymbol{p}_c-\boldsymbol{p}_b)$积出,最后得到

$$i\left[\langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_a^{(+)}\rangle-\langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_c^{(+)}\rangle^*\right]$$
$$=2\pi\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3 p_b\delta(E_b-E_c)\langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_c^{(+)}\rangle^*\langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_a^{(+)}\rangle$$
$$=\frac{1}{(2\pi)^2}\int p_b^2 dp_b d\Omega_b\delta(E_b-E_c)\langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_c^{(+)}\rangle^*\langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_a^{(+)}\rangle$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{\mathrm{d}p_b}{\mathrm{d}E_b} \mathrm{d}E_b \mathrm{d}\Omega_b p_b^2 \delta(E_b - E_c) \langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_c^{(+)} \rangle^* \langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_a^{(+)} \rangle$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} p_c^2 \frac{\mathrm{d}p_c}{\mathrm{d}E_c} \int \mathrm{d}\Omega_b \langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_c^{(+)} \rangle^* \langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_a^{(+)} \rangle \big|_{p_b = p_c} \tag{5.4.16}$$

最后一个等式中积分后的 $p_b = p_c$ 记号表示对 $\boldsymbol{p}_b$ 的积分只对角度积分，p_b 的大小保持等于 p_c.

现在考虑向前散射，即 $\boldsymbol{p}_c = \boldsymbol{p}_a$ 的特殊情形. 考虑到

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p} = \frac{p}{m} \tag{5.4.17}$$

$$\begin{aligned} &\mathrm{i}\left[\langle \boldsymbol{p}_a \mid \hat{V} \mid \psi_c^{(+)} \rangle^* - \langle \boldsymbol{p}_c \mid \hat{V} \mid \psi_a^{(+)} \rangle\right]_{a=c} \\ &= -2\mathrm{Im}\langle \boldsymbol{p}_c \mid \hat{V} \mid \psi_a^{(+)} \rangle \end{aligned} \tag{5.4.18}$$

以及

$$f_{p_a}(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi} \langle \boldsymbol{p}_b \mid \hat{V} \mid \psi_a^{(+)} \rangle \tag{5.4.19}$$

把这些关系式代入(5.4.16)，同时考虑到

$$\mid \boldsymbol{p}_a \mid = \mid \boldsymbol{p}_c \mid = \mid \boldsymbol{p}_b \mid = p \tag{5.4.20}$$

以及 $\boldsymbol{p}_c$ 是向前散射的特殊情形，结合(5.4.18)和(5.4.19)式，得

$$\begin{aligned} &\mathrm{i}\left[\langle \boldsymbol{p}_a \mid \hat{V} \mid \psi_c^{(+)} \rangle^* - \langle \boldsymbol{p}_c \mid \hat{V} \mid \psi_a^{(+)} \rangle\right] \big|_{\boldsymbol{p}_c \parallel z} \\ &= \frac{4\pi}{m} \mathrm{Im} f(0,0) \end{aligned} \tag{5.4.21}$$

(5.4.16)式可化成

$$\frac{4\pi}{m} \mathrm{Im} f_k(0,0) = \frac{p}{m} \int \mathrm{d}\Omega \mid f_k(\theta, \varphi) \mid^2 = \frac{p}{m} \sigma$$

即

$$\mathrm{Im} f_k(0,0) = \frac{p}{4\pi} \sigma \tag{5.4.22}$$

其中 σ 是散射的总截面. (5.4.22)式给出了全散射截面和向前散射的 f_k 虚部之间的关系，这就是光学定理.

对此讨论如下：

(a) 光学定理是 S 算符幺正性的结果，是势散射的一个与具体情况无关的普遍性结果.

(b) 既然 S 算符的幺正性来自几率守恒，其与系统及势作用的细节没有关系. 所以光学定理对任何一个散射过程都适用，是一个普遍的结果.

(c) 从实验上可以去检验光学原理是否成立，也就是检验在散射过程中几率是否守恒. 详细地说，就是检验向前散射与入射平面波是否有干涉的效应. 如果实

验验证的结果是肯定的，这就回答了本节一开始提出的问题.

(d) 粒子物理在二十世纪六七十年代里根据相互作用过程中的幺正性导出类似于光学定理的色散关系，从而可以不必知道动力学的细节就可由这些关系得出若干有价值的结论.

5.5 散射的传播子近似

现在再用传播子的方法来讨论散射问题，其目的是想说明量子理论的问题都可用传播子的系统方法处理.

5.5.1 有势作用的传播子

传播子的一级近似可表示为

$$k^{(1)}(\boldsymbol{R}_2,t;\boldsymbol{R}_1,0)=-\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t'\int \mathrm{d}^3 r k^{(0)}(\boldsymbol{R}_2,t;\boldsymbol{r},t')V(\boldsymbol{r})k^{(0)}(\boldsymbol{r},t';\boldsymbol{R}_1,0)$$

这里将$(\boldsymbol{R}_1,0)$简记为 1，$(\boldsymbol{R}_2,t)$简记为 2，而自由粒子的传播子为

$$k^{(0)}(\boldsymbol{r},t';\boldsymbol{R}_1,0)=\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}t'}\right)^{3/2}\exp\frac{\mathrm{i}m(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_1)^2}{2t'}$$

$$k^{(0)}(\boldsymbol{R}_2,t;\boldsymbol{r},t')=\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}(t-t')}\right)^{3/2}\exp\frac{\mathrm{i}m(\boldsymbol{R}_2-\boldsymbol{r})^2}{2(t-t')}$$

因此有

$$\begin{aligned}k^{(1)}(2,1)&=-\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t'\int \mathrm{d}^3 r k^{(0)}(\boldsymbol{R}_2,t;\boldsymbol{r},t')V(\boldsymbol{r})k^{(0)}(\boldsymbol{r},t';\boldsymbol{R}_1,0)\\&=-\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t'\int \mathrm{d}^3 r\left[\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}(t-t')}\right)^{3/2}\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}t}\right)^{3/2}\right.\\&\quad\left.\cdot\exp\left[\frac{\mathrm{i}m(\boldsymbol{R}_2-\boldsymbol{r})^2}{2(t-t')}+\frac{\mathrm{i}m(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_1)^2}{2t'}\right]V(\boldsymbol{r})\right.\end{aligned}\qquad(5.5.1)$$

利用如下的积分公式

$$\int_0^T \exp\left(-\frac{a}{T-t}-\frac{b}{t}\right)\frac{\mathrm{d}t}{(T-t)^{3/2}t^{3/2}}=\sqrt{\frac{\pi}{T^3}}\frac{\sqrt{a}+\sqrt{b}}{\sqrt{ab}}\exp\left[-\frac{1}{T}(\sqrt{a}+\sqrt{b})^2\right]$$

可将(5.5.1)式的时间积分积出

$$\begin{aligned}k^{(1)}(2,1)&=-\mathrm{i}\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}t}\right)^{5/2}t\int \mathrm{d}^3 r V(\boldsymbol{r})\left[\frac{1}{|\boldsymbol{R}_2-\boldsymbol{r}|}+\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_1|}\right]\\&\quad\cdot\exp\frac{\mathrm{i}m}{2t}[|\boldsymbol{R}_2-\boldsymbol{r}|+|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_1|]^2\end{aligned}\qquad(5.5.2)$$

5.5.2 势散射中的传播子

以上是对一般情况而言的. 现在结合散射的具体物理情况来讨论，即初末态的

粒子的位置远离势的有效区域，也即与 $V(\boldsymbol{r})$ 不为零对应的有效积分变量 $r\ll R_1$，R_2. 于是，可采取近似

$$
\begin{aligned}
|\boldsymbol{R}_2-\boldsymbol{r}| &= (R_2^2-2\boldsymbol{R}_2\cdot\boldsymbol{r}+r^2)^{\frac{1}{2}}\approx R_2-\hat{p}_f\cdot\boldsymbol{r}\\
|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_1| &= (R_1^2-2\boldsymbol{R}_1\cdot\boldsymbol{r}+r^2)^{\frac{1}{2}}\approx R_1+\hat{p}_i\cdot\boldsymbol{r}
\end{aligned}
\tag{5.5.3a}
$$

注意：$\hat{p}_f=\hat{R}_2$，$\hat{p}_i=-\hat{R}_1$ 是初、末动量方向的单位矢量，而原点取在作用势范围中(见图 5.9)，利用(5.5.3a)的近似式可将(5.5.2)式的被积函数的相应部分分别近似取作

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{|\boldsymbol{R}_2-\boldsymbol{r}|}+\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_1|}\approx\frac{1}{R_2}+\frac{1}{R_1}\\
&[|\boldsymbol{R}_2-\boldsymbol{r}|+|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_1|]^2\cong[R_1+R_2+(\hat{p}_i-\hat{p}_f)\cdot\boldsymbol{r}]^2\\
&\qquad=(R_1+R_2)^2\left[1+\frac{(\hat{p}_i-\hat{p}_f)\cdot\boldsymbol{r}}{R_1+R_2}\right]^2\\
&\qquad\cong(R_1+R_2)^2+2(R_1+R_2)(\hat{p}_i-\hat{p}_f)\cdot\boldsymbol{r}
\end{aligned}
\tag{5.5.3b}
$$

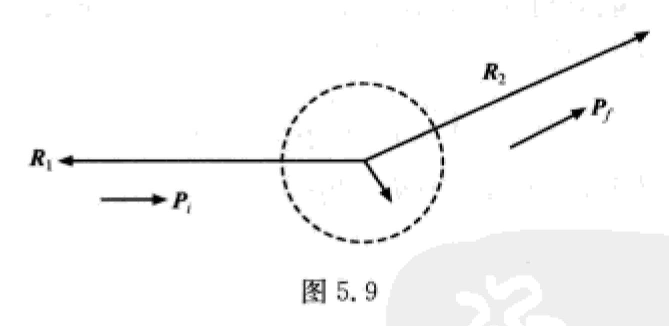


图 5.9

此外，在整个的散射过程中，由于作用势的有效范围比 R_1，R_2 小很多，所以在 $t\to 0$ 的时间间隔里粒子在大部分时间里几乎都是处于自由粒子的状态，所以有

$$
u\approx\frac{R_1+R_2}{t}
\tag{5.5.4}
$$

利用这些近似表示，可将(5.5.2)式重新表示为

$$
\begin{aligned}
k^{(1)}(2,1)=&-\mathrm{i}\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}t}\right)^{5/2}t\left(\frac{1}{R_1}+\frac{1}{R_2}\right)\exp\frac{\mathrm{i}m}{2t}(R_1+R_2)^2\\
&\int\mathrm{d}^3rV(\boldsymbol{r})\exp\frac{\mathrm{i}m}{t}(R_1+R_2)\boldsymbol{r}\cdot(\hat{p}_i-\hat{p}_f)\\
=&-\mathrm{i}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}t}\right)^{5/2}\left(\frac{1}{t}\right)^{3/2}\left(\frac{R_1+R_2}{R_1R_2}\right)\exp\frac{\mathrm{i}m}{2}\left(\frac{R_1+R_2}{t}\right)^2t\\
&\int\mathrm{d}^3rV(\boldsymbol{r})\exp[\mathrm{i}mv\boldsymbol{r}\cdot(\hat{p}_i-\hat{p}_f)]
\end{aligned}
$$

$$=-\mathrm{i}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}t}\right)^{5/2}\left(\frac{1}{t}\right)^{3/2}\left(\frac{R_1+R_2}{R_1R_2}\right)\exp\frac{\mathrm{i}m}{2}\left(\frac{R_1+R_2}{t}\right)^2 t$$

$$\int\mathrm{d}^3 rV(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{p}_i-\boldsymbol{p}_f)}$$

$$=-\mathrm{i}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}}\right)^{5/2}\left(\frac{1}{t}\right)^{1/2}\left(\frac{u}{R_1R_2}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{mu^2}{2}t}\cdot\widetilde{V}(\boldsymbol{p}_i-\boldsymbol{p}_f)$$

$$=-i\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}}\right)^{5/2}\frac{u}{t^{1/2}R_1R_2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et}\widetilde{V}(\boldsymbol{q}) \tag{5.5.5}$$

等式中用了以下的关系

$$E=\frac{1}{2}mu^2 \tag{5.5.6}$$

$$\widetilde{V}(\boldsymbol{q})=\int\mathrm{d}^3 rV(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{5.5.7}$$

以及

$$\frac{m}{t}(R_1+R_2)\boldsymbol{r}\cdot(\hat{p}_i-\hat{p}_f)=mu\boldsymbol{r}\cdot(\hat{p}_i-\hat{p}_f)=\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{p}_i-\boldsymbol{p}_f) \tag{5.5.8}$$

根据传播子的意义,散射到点 2 邻域的 ΔA 小体积中的几率为

$$P(2)=|k^{(1)}(2,1)|^2\Delta A$$

$$=\left(\frac{m}{2\pi}\right)^5\frac{u^2}{tR_1^2R_2^2}|\widetilde{V}(\boldsymbol{q})|^2\Delta A \tag{5.5.9}$$

另一方面,如没有散射,粒子自由地从 1 传播至 3

$$k^{(0)}(3,1)=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}t}\right)^{3/2}\exp\frac{\mathrm{i}m(R_1+R_2)^2}{2t} \tag{5.5.10}$$

得

$$\frac{p(3)}{\Delta A}=\frac{|k^{(0)}(3,1)|^2\Delta A}{\Delta A}=\left(\frac{m}{2\pi t}\right)^3$$

$$=\left(\frac{m}{2\pi}\right)^3\frac{1}{t}\frac{1}{t^2}$$

$$=\left(\frac{m}{2\pi}\right)^3\frac{u^2}{t(R_1+R_2)^2} \tag{5.5.11}$$

由(5.5.9)及(5.5.11)式得

$$\frac{p(2)}{p(3)}=\left|\frac{m}{2\pi}\widetilde{V}(\boldsymbol{q})\right|^2\frac{(R_1+R_2)^2}{R_1^2R_2^2} \tag{5.5.12}$$

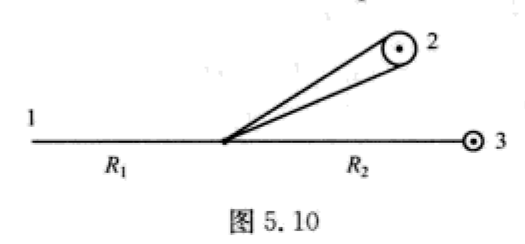


图 5.10

现在也可按照图 5.10 所示形象地分析,得出微分散射截面的表示. 从 1 处出发经过散射中心后只有很小的几率被散射. 忽略掉这一小部分,可近似设为从 1 到 3 的过程中单位面积上粒子流仍保持不变.

从1处过来的粒子流按微分截面的定义,它在力心处截面的单位面积上有一个 $\mathrm{d}\sigma$ 的流散射到2处的 $\mathrm{d}\Omega$ 立体角元内.但这一小面积从3点处看已放大成 $\frac{(R_1+R_2)^2}{R_1{}^2}\mathrm{d}\sigma$.由于这是散射到2点处的小面积 $R_2{}^2\mathrm{d}\Omega$ 上的,于是从3点处来看,散射到2点方向的 $\mathrm{d}\Omega$ 内的几率来自小面积

$$\frac{(R_1+R_2)^2}{R_1{}^2}\mathrm{d}\sigma/R_2{}^2\mathrm{d}\Omega$$

这样散射到2点的几率和直接传播到3点的几率之比就是上面的小面积与单位面积之比,即

$$\frac{p(2)}{p(3)}=\frac{\mathrm{d}\sigma\,(R_1+R_2)^2/R_1{}^2}{R_2{}^2\mathrm{d}\Omega} \tag{5.5.13}$$

再与(5.5.12)式相比较,可得

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\left|\frac{m}{2\pi}\widetilde{V}(\boldsymbol{q})\right|^2 \tag{5.5.14}$$

5.5.3 两种散射处理方式的比较

至此可以对前面用波函数的方法与用传播子方法讨论散射作一比较.

(a) 波函数方法讨论散射时侧重于波动性质的讨论,传播子方法则侧重于用粒子的图像,恰恰反映了量子理论下的波粒二象性.

(b) 两个方法都具有近似的微扰展开.

(c) 传播子方法还得到了微分散射截面与势的关系.

(d) 传播子方法中自然不存在波函数方法中的波包散射用平面波近似处理的问题.

如果不满足于一级近似的精度,可以计算到高阶的近似.这里以二阶近似为例,更高阶的近似可以循此作下去.写出二阶近似的传播子

$$\begin{aligned}
k^{(2)}(2,1)=&(-\mathrm{i})^2\int_0^t\mathrm{d}t_2\int_0^{t_2}\mathrm{d}t_1\int\mathrm{d}^3r_2\int\mathrm{d}^3r_1 k^{(0)}(\boldsymbol{R}_2,t_2;\boldsymbol{r}_2,t_2)V(\boldsymbol{r}_2)\\
&\cdot k^{(0)}(\boldsymbol{r}_2,t_2;\boldsymbol{r}_1,t_1)V(\boldsymbol{r}_1)k^{(0)}(\boldsymbol{r}_1,t_1;\boldsymbol{R}_1,0)\\
=&(-\mathrm{i})^2\int_0^t\mathrm{d}t_2\int_0^{t_2}\mathrm{d}t_1\int\mathrm{d}^3r_2\int\mathrm{d}^3r_1\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}(t_2-t_1)}\right)^{\frac{3}{2}}\\
&\exp\left[\frac{\mathrm{i}m\,(\boldsymbol{R}_2-\boldsymbol{r}_2)^2}{2(t-t_2)}\right]V(\boldsymbol{r}_2)\cdot\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}(t_2-t_1)}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left[\frac{\mathrm{i}m\,(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)^2}{2(t_2-t_1)}\right]\\
&V(\boldsymbol{r}_1)\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}t_1}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left[\frac{\mathrm{i}m\,(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{R}_1)^2}{2t_1}\right]
\end{aligned} \tag{5.5.15}$$

如前,依次将两个时间变量积出

$$k^{(2)}(2,1)=(-\mathrm{i})^2\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}t}\right)^{7/2}t^2\int\mathrm{d}^3r_1\int\mathrm{d}^3r_2\,\frac{|\boldsymbol{R}_2-\boldsymbol{r}_2|+|\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1|+|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{R}_1|}{|\boldsymbol{R}_2-\boldsymbol{r}_2|\cdot|\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1|\cdot|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{R}_1|}$$

$$\cdot V(\boldsymbol{r}_1)V(\boldsymbol{r}_2)\exp\left[\frac{im}{2t}(|\boldsymbol{R}_2-\boldsymbol{r}_2|+|\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1|+|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{R}_1|)^2\right] \tag{5.5.16}$$

和前面一样的考虑，由于有效力程有限，有

$$R_1, R_2 \gg r_1, r_2$$

利用它，仿照前面(5.5.3a)，(5.5.3b)，(5.5.4)式取近似导出(5.5.5)式的过程，将(5.5.16)式化为

$$\begin{aligned}k^{(2)}(2,1)=&\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}}\right)^{3/2}\frac{v}{t^{\frac{1}{2}}R_1R_2}\left(\frac{m}{2\pi}\right)^2\exp(\mathrm{i}Et)\\&\cdot\int \mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2V(\boldsymbol{r}_1)V(\boldsymbol{r}_2)\exp[\mathrm{i}\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{r}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_f\cdot\boldsymbol{r}_2]\\&\cdot\frac{\exp[\mathrm{i}p_i|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|]}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}\end{aligned} \tag{5.5.17}$$

把传播子的一级近似和二级近似加起来，其模的平方是 $P(2)$. 重复前面在一级近似下的$\dfrac{P(2)}{P(3)}$的计算，便得到

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=|F(E_i)|^2 \tag{5.5.18}$$

其中

$$\begin{aligned}F(E_i)=&-\frac{m}{2\pi}\int \mathrm{d}^3r\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}_i-\boldsymbol{p}_f)\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})\\&+\left(\frac{m}{2\pi}\right)^2\int \mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_f\cdot\boldsymbol{r}_2}V(\boldsymbol{r}_2)\frac{\exp\mathrm{i}p_i|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}V(\boldsymbol{r}_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{r}_1}\end{aligned} \tag{5.5.19}$$

上式的第一项是 $k^{(1)}(2,1)$的贡献，第二项是 $k^{(2)}(2,1)$的贡献. 如略去后者，便回到(5.5.14)式的结果.

5.6 两体的散射

前面讨论了单个粒子在势作用下的问题，现在讨论两粒子的散射或相互作用，有很多地方可以仿照此前的讨论. 此外，下面要考虑的两粒子间的相互作用是借助于一种中介粒子在两粒子间转移能量与动量，换句话说，两粒子间相互作用实质是中介粒子与两粒子相互作用的结果. 不过，认真讨论这种具有中介粒子的粒子间相互作用问题只能在量子场论的理论框架下才能进行. 这里我们只讨论用两粒子间作用势去代替中介粒子作用等效势的情况.

5.6.1 两体势散射

两粒子质量分别为 m_1, m_2，分别位于 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$. 假定它们间存在一个与 $\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$ 有关的相互作用势，因此势算符在动量空间中的矩阵元 $\langle \boldsymbol{p}_1^f \boldsymbol{p}_2^f | \hat{V} | \boldsymbol{p}_1^i \boldsymbol{p}_2^i \rangle$ 只有在初末态的总动量相等时才不为零，否则为零. 关于这一点的证明如下：

先看势算符在位形空间中的矩阵元

$$
\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{r}_1' \boldsymbol{r}_2' | \hat{V} | \boldsymbol{r}_1 \boldsymbol{r}_2 \rangle &= \langle \boldsymbol{r}_1' \boldsymbol{r}_2' | \hat{V}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2) | \boldsymbol{r}_1 \boldsymbol{r}_2 \rangle \\
&= V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2) \langle \boldsymbol{r}_1' \boldsymbol{r}_2' | \boldsymbol{r}_1 \boldsymbol{r}_2 \rangle \\
&= \delta^3(\boldsymbol{r}_1'-\boldsymbol{r}_1)\delta^3(\boldsymbol{r}_2'-\boldsymbol{r}_2) V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)
\end{aligned}
\tag{5.6.1}
$$

利用上式有

$$
\begin{aligned}
&\langle \boldsymbol{p}_1^f \boldsymbol{p}_2^f | \hat{V} | \boldsymbol{p}_1^i \boldsymbol{p}_2^i \rangle \\
&= \int \mathrm{d}^3 r_1 \mathrm{d}^3 r_2 \langle \boldsymbol{p}_1^f \boldsymbol{p}_2^f | \boldsymbol{r}_1 \boldsymbol{r}_2 \rangle \langle \boldsymbol{r}_1 \boldsymbol{r}_2 | \hat{V} | \boldsymbol{r}_1' \boldsymbol{r}_2' \rangle \langle \boldsymbol{r}_1' \boldsymbol{r}_2' | \boldsymbol{p}_1^i \boldsymbol{p}_2^i \rangle \mathrm{d}^3 r_1' \mathrm{d}^3 r_2' \\
&= \int \mathrm{d}^3 r_1 \mathrm{d}^3 r_2 \mathrm{d}^3 r_1' \mathrm{d}^3 r_2' \langle \boldsymbol{p}_1^f \boldsymbol{p}_2^f | \boldsymbol{r}_1 \boldsymbol{r}_2 \rangle \delta^3(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_1') \\
&\quad \delta^3(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_2') V(\boldsymbol{r}_1'-\boldsymbol{r}_2') \langle \boldsymbol{r}_1' \boldsymbol{r}_2' | \boldsymbol{p}_1^i \boldsymbol{p}_2^i \rangle \\
&= \int \mathrm{d}^3 r_1 \mathrm{d}^3 r_2 \langle \boldsymbol{p}_1^f \boldsymbol{p}_2^f | \boldsymbol{r}_1 \boldsymbol{r}_2 \rangle V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2) \langle \boldsymbol{r}_1 \boldsymbol{r}_2 | \boldsymbol{p}_1^i \boldsymbol{p}_2^i \rangle \\
&= \int \mathrm{d}^3 r_1 \mathrm{d}^3 r_2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_1^f \cdot \boldsymbol{r}_1 - \mathrm{i}\boldsymbol{p}_2^f \cdot \boldsymbol{r}_2 + \mathrm{i}\boldsymbol{p}_1^i \cdot \boldsymbol{r}_1 + \mathrm{i}\boldsymbol{p}_2^i \cdot \boldsymbol{r}_2} V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)
\end{aligned}
\tag{5.6.2}
$$

作代换

$$
\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2, \quad \boldsymbol{R} = \frac{m_1 \boldsymbol{r}_1 + m_2 \boldsymbol{r}_2}{m_1 + m_2}
\tag{5.6.3}
$$

使之变换到用质心坐标和相对坐标来表示，这个变换的 Jacobian 为 1. (5.6.2)式中的指数上的因子，可改写为

$$
-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_1^f \cdot \boldsymbol{r}_1 = -\mathrm{i}\boldsymbol{p}_1^f \cdot R - \mathrm{i}\boldsymbol{r} \cdot \frac{m_2 \boldsymbol{p}_1^f}{m_1 + m_2}
$$

其余三个 $-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_2^f \cdot \boldsymbol{r}_2$，$-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_1^i \cdot \boldsymbol{r}_1$，$-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_2^i \cdot \boldsymbol{r}_2$ 有类似的关系.

于是可将(5.6.2)式改写成

$$
\begin{aligned}
&\langle \boldsymbol{p}_1^f \boldsymbol{p}_2{}^f | \hat{V} | \boldsymbol{p}_1^i \boldsymbol{p}_2^i \rangle \\
&= \int \mathrm{d}^3 R \exp[\mathrm{i}\boldsymbol{R} \cdot (\boldsymbol{p}_1^i + \boldsymbol{p}_2^i - \boldsymbol{p}_1^f - \boldsymbol{p}_2^f)] \\
&\quad \cdot \int \mathrm{d}^3 r V(\boldsymbol{r}) \exp\left[\mathrm{i}\boldsymbol{r} \cdot \left(\frac{m_2 \boldsymbol{p}_1^i - m_1 \boldsymbol{p}_2^i}{m_1 + m_2} - \frac{m_2 \boldsymbol{p}_1^f - m_1 \boldsymbol{p}_2^f}{m_1 + m_2}\right)\right] \\
&= (2\pi)^3 \delta^3(\boldsymbol{p}_1^i + \boldsymbol{p}_2^i - \boldsymbol{p}_1^f - \boldsymbol{p}_2^f) \cdot \int \mathrm{d}^3 r V(\boldsymbol{r})
\end{aligned}
$$

$$\exp\left[\mathrm{i}\boldsymbol{r}\cdot\left(\frac{m_2\boldsymbol{p}_1^i-m_1\boldsymbol{p}_2^i}{m_1+m_2}-\frac{m_2\boldsymbol{p}_1^f-m_1\boldsymbol{p}_2^f}{m_1+m_2}\right)\right] \tag{5.6.4}$$

再引入质心系的总动量

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2$$

及相对动量

$$\boldsymbol{p}=\frac{m_2\boldsymbol{p}_1-m_1\boldsymbol{p}_2}{m_1+m_2}$$

这样(5.6.4)式最终写成

$$\langle\boldsymbol{p}_1^f\boldsymbol{p}_2^f\mid\hat{V}\mid\boldsymbol{p}_1^i\boldsymbol{p}_2^i\rangle=(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{P}_i-\boldsymbol{P}_f)V_{\boldsymbol{p}_f,\boldsymbol{p}_i} \tag{5.6.5}$$

其中

$$\begin{aligned}V_{\boldsymbol{p}_f,\boldsymbol{p}_i}&\equiv\int\mathrm{d}^3r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_f\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{r}}\\&=\int\mathrm{d}^3r\langle\boldsymbol{p}_f\mid\boldsymbol{r}\rangle V(\boldsymbol{r})\langle\boldsymbol{r}\mid\boldsymbol{p}_i\rangle\\&=\langle\boldsymbol{p}_f\mid\hat{V}\mid\boldsymbol{p}_i\rangle\end{aligned} \tag{5.6.6}$$

是势能的傅里叶变换.最后得到的(5.6.5)式中右方的$\delta^3(\boldsymbol{P}_i-\boldsymbol{P}_f)$保证了总动量在两体相互作用时守恒,这就证明了两粒子相互作用时初末态的总动量相等.

5.6.2 两体散射几率幅

仍从普遍的公式出发,系统从初态$|i\rangle$经散射到$|f\rangle$的散射几率幅为

$$\begin{aligned}Amp_{f,i}&=\langle f\mid S\mid i\rangle\\S&=1-2\pi\mathrm{i}\delta(E_f-E_i)T\\\langle f\mid T\mid i\rangle&=F(E_i)\end{aligned} \tag{5.6.7}$$

$F(E_i)$的微扰展开式为

$$F(E_i)=\langle f\mid\hat{V}\mid i\rangle+\langle f\mid\hat{V}\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+\mathrm{i}\epsilon}\hat{V}\mid i\rangle+\cdots \tag{5.6.8}$$

现在考虑的是两体散射,因此其初末态可表示为

$$\text{初态}\quad|\Phi_i\rangle=|\boldsymbol{p}_1^i\boldsymbol{p}_2^i\rangle\quad E_i=\frac{(\boldsymbol{p}_1^i)^2}{2m_1}+\frac{(\boldsymbol{p}_2^i)^2}{2m_2}$$

$$\text{末态}\quad|\Phi_f\rangle=|\boldsymbol{p}_1^f\boldsymbol{p}_2^f\rangle\quad E_f=\frac{(\boldsymbol{p}_1^f)^2}{2m_1}+\frac{(\boldsymbol{p}_2^f)^2}{2m_2}$$

代入(5.6.7)及(5.6.8)式,分别计算 Amp 的一级近似和二级近似.注意,为了书写简便,以下将 Amp 中含的$\delta_{fi}=\langle f|i\rangle$略去不写.

(a)
$$\begin{aligned}Amp^{(1)}&=-2\pi\mathrm{i}\delta(E_f-E_i)F^{(1)}(E_i)=-2\pi\mathrm{i}\delta(E_f-E_i)\langle\boldsymbol{p}_1^f\boldsymbol{p}_2^f|\hat{V}|\boldsymbol{p}_1^i\boldsymbol{p}_2^i\rangle\\&=-2\pi\mathrm{i}\delta(E_f-E_i)(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{P}_f-\boldsymbol{P}_i)\langle\boldsymbol{p}_f|\hat{V}|\boldsymbol{p}_i\rangle\end{aligned} \tag{5.6.9}$$

最后一个等式用到了(5.6.5)式. $Amp^{(1)}$ 可用图 5.11 来表示.

(b) $$Amp^{(2)}=-2\pi\mathrm{i}\delta(E_f-E_i)\langle \boldsymbol{p}_1^f\boldsymbol{p}_2^f|\hat{V}\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+\mathrm{i}\epsilon}\hat{V}|\boldsymbol{p}_1^i\boldsymbol{p}_2^i\rangle$$

$$=-2\pi\mathrm{i}\delta(E_f-E_i)\int\frac{\mathrm{d}^3K_1}{(2\pi)^3}\frac{\mathrm{d}^3K_2}{(2\pi)^3}\frac{\langle \boldsymbol{p}_1^f\boldsymbol{p}_2^f|\hat{V}|\boldsymbol{K}_1\boldsymbol{K}_2\rangle\langle \boldsymbol{K}_1\boldsymbol{K}_2|\hat{V}|\boldsymbol{p}_1^i\boldsymbol{p}_2^i\rangle}{E_i-\frac{1}{2m}\boldsymbol{K}_1^2-\frac{1}{2m_2}\boldsymbol{K}_2^2+\mathrm{i}\epsilon}$$

(5.6.10)

上式可用图 5.12 来表示.

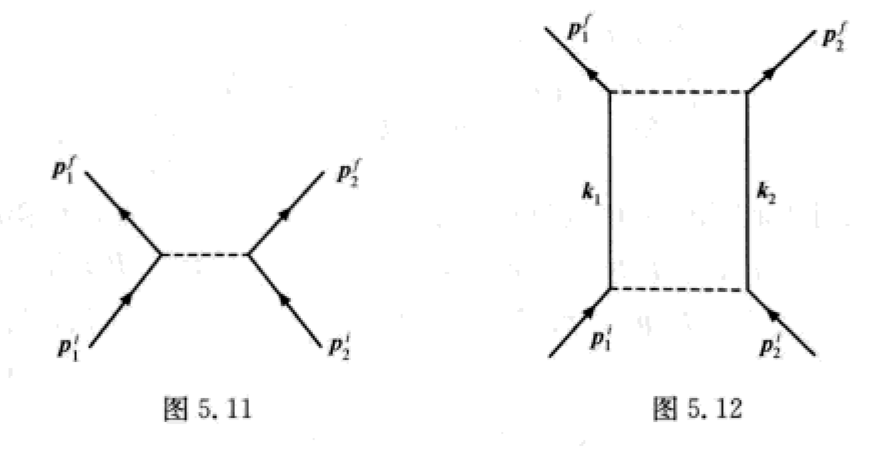


图 5.11　　　　图 5.12

利用(5.6.5)式可将$\langle \boldsymbol{p}_1^f\boldsymbol{p}_2^f|\hat{V}|\boldsymbol{K}_1\boldsymbol{K}_2\rangle$和$\langle \boldsymbol{K}_1\boldsymbol{K}_2|\hat{V}|\boldsymbol{p}_1^i\boldsymbol{p}_2^i\rangle$用质心系的总动量 $\boldsymbol{K}$ 和相对动量 $\boldsymbol{k}$ 来表示

$$\langle \boldsymbol{p}_1^f\boldsymbol{p}_2^f\mid\hat{V}\mid\boldsymbol{K}_1\boldsymbol{K}_2\rangle=(2\pi)^3(\boldsymbol{K}-\boldsymbol{P}_f)V_{\boldsymbol{p}_f,\boldsymbol{k}}$$

$$\langle \boldsymbol{K}_1\boldsymbol{K}_2\mid\hat{V}\mid\boldsymbol{p}_1^i\boldsymbol{p}_2^i\rangle=(2\pi)^3(\boldsymbol{K}-\boldsymbol{P}_i)V_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}_i}$$

$$E_i=\frac{\boldsymbol{P}_i^2}{2(m_1+m_2)}+\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2\mu}$$

$$\frac{\boldsymbol{K}_1^2}{2m_1}+\frac{\boldsymbol{K}_2^2}{2m_2}=\frac{\boldsymbol{K}^2}{2(m_1+m_2)}+\frac{\boldsymbol{k}^2}{2\mu}$$

$$E_f=\frac{\boldsymbol{P}_f^2}{2(m_1+m_2)}+\frac{\boldsymbol{p}_f^2}{2\mu}$$

其中 $\mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$为两粒子的约化质量.

于是可将(5.6.10)式改写为

$$Amp^{(2)}=-2\pi\mathrm{i}\delta(E_f-E_i)$$

$$\cdot\int\frac{\mathrm{d}^3k\mathrm{d}^3K}{(2\pi)^6}\frac{(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{P}_f-\boldsymbol{K})V_{\boldsymbol{p}_f,\boldsymbol{k}}\,(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{K}-\boldsymbol{P}_i)V_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}_i}}{\frac{\boldsymbol{P}_i^2}{2(m_1+m_2)}+\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2\mu}-\frac{\boldsymbol{K}^2}{2(m_1+m_2)}-\frac{\boldsymbol{k}^2}{2\mu}+\mathrm{i}\epsilon}$$

$$= -2\pi i\delta(E_f - E_i)(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{P}_f - \boldsymbol{P}_i)\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{V_{\boldsymbol{p}_f,\boldsymbol{k}}V_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}_i}}{\frac{\boldsymbol{p}_i}{2\mu} - \frac{\boldsymbol{k}^2}{2\mu} + i\varepsilon} \tag{5.6.11}$$

上式第一等式的右方中由于分子上有 $\delta^3(\boldsymbol{K} - \boldsymbol{P}_i)$，所以分母中的$\frac{\boldsymbol{P}_i^2}{2(m_1+m_2)}$与$\frac{\boldsymbol{K}^2}{2(m_1+m_2)}$相消而得到最后的式子.

(c) 类似地，可写出 $Amp^{(3)}$ 及相应的图 5.13.

$$Amp^{(3)} = -2\pi i\delta(E_f - E_i)(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{P}_f - \boldsymbol{P}_i)$$
$$\cdot\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\frac{V_{\boldsymbol{p}_f,\boldsymbol{k}'}V_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}}V_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}_i}}{\left(\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2\mu} - \frac{\boldsymbol{k}^2}{2\mu} + i\varepsilon\right)\left(\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2\mu} - \frac{\boldsymbol{k}'^2}{2\mu} + i\varepsilon\right)} \tag{5.6.12}$$

其他的高阶项可类似写出. 总的散射几率幅因此可以写成(现在加上了零级项)

$$Amp_{f,i} = \langle \boldsymbol{p}_1^f\boldsymbol{p}_2^f \mid \boldsymbol{p}_1^i\boldsymbol{p}_2^i\rangle - 2\pi i\delta(E_f - E_i)(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{P}_f - \boldsymbol{P}_i)T_{fi}$$
$$= (2\pi)^6\delta^3(\boldsymbol{p}_1^f - \boldsymbol{p}_1^i)\delta^3(\boldsymbol{p}_2^f - \boldsymbol{p}_2^i) - i(2\pi)^4\delta^4(P_f - P_i)T_{fi} \tag{5.6.13}$$

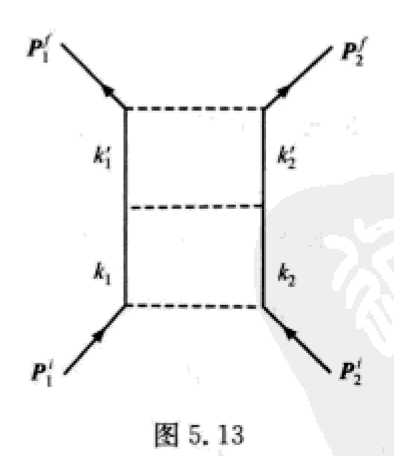


图 5.13

对上面的内容作几点讨论：

(a) (5.6.13)式中的第一项是向前散射，对于要改变方向的散射没有贡献.

(b) (5.6.13)式中的 T_{fi} 与原来定义的 T_{fi} 略有不同. 这里已把 $\delta^3(\boldsymbol{p}_f - \boldsymbol{p}_i)$明显提出.

$$T_{fi} = V_{\boldsymbol{p}_f,\boldsymbol{p}_i} + \int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{V_{\boldsymbol{p}_f,\boldsymbol{k}}V_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}_i}}{\frac{\boldsymbol{p}_i}{2\mu} - \frac{\boldsymbol{k}^2}{2\mu} + i\varepsilon} + \cdots \tag{5.6.14}$$

(c) 这里的势散射的费曼图和量子场论中的两体相互作用的费曼图有所不同. 这里只有梯形图而无<这样的顶角图，因为在这里没有明显地将中介粒子的作

用表示出来.

(d) 总的来说,如同经典力学中一样,已把两体的散射问题化为一个有效的一体问题.

5.6.3 两体散射截面

不讨论向前的方向而只注意改变方向的散射,则跃迁的几率按(5.6.13)式的第二项来计算

$$\rho(|i\rangle \to |f\rangle) = [(2\pi)^4\delta^4(P_f - P_i)]^2 \, |T_{fi}|^2$$

利用

$$(2\pi)^4\delta^4(P_f - P_i) = \int d^4x \exp[i(P_f - P_i)\cdot x] \tag{5.6.15}$$

注意上式中$(P_f - P_i)\cdot x$是四维时空的点积,即

$$(P_f - P_i)\cdot x = (E_f - E_i)t + (\boldsymbol{P}_f - \boldsymbol{P}_i)\cdot \boldsymbol{r}$$

则有

$$\begin{aligned}\rho(|i\rangle \to |f\rangle) &= (2\pi)^4\delta^4(P_f - P_i)\int d^4x \exp[i(P_f - P_i)\cdot x]\cdot |T_{fi}|^2 \\ &= (2\pi)^4\delta^4(P_f - P_i)\,|T_{fi}|^2\int d^4x \\ &= (2\pi)^4\delta^4(P_f - P_i)\,|T_{fi}|^2(VT)\end{aligned} \tag{5.6.16}$$

其中V是考虑的整个范围的体积,T是全部的时间.

现在考虑在单位体积内单位时间里跃迁到所有的可能终态的几率,这时可将VT除掉并对所有终态求和(对各种可能的终态动量求和).

于是散射截面可以计算如下

$$\begin{aligned}&\text{单位时间单位体积中的跃迁几率} \\ &= \int \frac{d^3p_1^f}{(2\pi)^3}\frac{d^3p_2^f}{(2\pi)^3}(2\pi)^4\delta^4(P_i - P_f)\,|T_{fi}|^2\end{aligned} \tag{5.6.17}$$

再除以入射流

$$\text{入射流} = n_1 n_2 \, |\boldsymbol{v}_1^i - \boldsymbol{v}_2^i| \tag{5.6.18}$$

其中n_1, n_2为两入射粒子的数密度,$|\boldsymbol{v}_1^i - \boldsymbol{v}_2^i|$是两粒子入射时的相对速度.取波函数归一为单位体积含一个粒子,即$n_1 = n_2 = 1$,于是在单位时间及单位体积里散射到所有终态的散射截面为

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{1}{|\boldsymbol{v}_1^i - \boldsymbol{v}_2^i|}\int \frac{d^3p_1^f}{(2\pi)^3}\frac{d^3p_2^f}{(2\pi)^3}(2\pi)^4\delta(E_i - E_f)\delta^3(\boldsymbol{P}_i - \boldsymbol{p}_1^f - \boldsymbol{p}_2^f)\,|T_{fi}|^2 \\ &= \frac{1}{|\boldsymbol{v}_1^i - \boldsymbol{v}_2^i|}\int \frac{1}{(2\pi)^2}(p_1^f)^2 dp_1 d\Omega_{1f}\,\delta\left(E_i - \frac{(p_1^f)^2}{2m_1} - \frac{(\boldsymbol{P}_i - \boldsymbol{p}_1^f)^2}{2m_2}\right)|T_{fi}|^2 \\ &= \frac{1}{|\boldsymbol{v}_1^i - \boldsymbol{v}_2^i|}\int \frac{1}{(2\pi)^2}(p_1^f)^2 d\Omega_{1f}\frac{1}{\frac{dE_i}{dp_1^f}}dE_i\,\delta\left(E_i - \frac{(p_1^f)^2}{2m_1} - \frac{(\boldsymbol{P}_i - \boldsymbol{p}_1^f)^2}{2m_2}\right)|T_{fi}|^2\end{aligned}$$

$$
=\frac{1}{|\boldsymbol{v}_1^i-\boldsymbol{v}_2^i|}\int\frac{1}{(2\pi)^2}(p_1^f)^2\mathrm{d}\Omega_{1f}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p_1^f}\left(\frac{(p_1^f)^2}{2m_1}+\frac{(\boldsymbol{P}_i-\boldsymbol{p}_1^f)^2}{2m_2}\right)\right]^{-1}|T_{fi}|^2
$$

$$
=\frac{1}{|\boldsymbol{v}_1^i-\boldsymbol{v}_2^i|}\int\frac{1}{(2\pi)^2}(p_1^f)^2\mathrm{d}\Omega_{1f}\frac{1}{\dfrac{p_1^f}{m_1}+\dfrac{p_1^f-P_i\cos\theta}{m_2}}|T_{fi}|^2 \tag{5.6.19}
$$

在上面的推导中,第三等式后已将对 $\mathrm{d}p_1^f$ 的积分换为对 $\mathrm{d}E_i$ 的积分. 由于积分号下的 δ 函数对 E_i 的积分可积出,再作分母下的微商即得第四等式. 上式中的 θ 是 $\boldsymbol{P}_i$ 与 $\boldsymbol{p}_1^f$ 之间的夹角. 上式两端对 $\mathrm{d}\Omega_{1f}$微分得

$$
\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_{1f}}=\frac{1}{|\boldsymbol{v}_1^i-\boldsymbol{v}_2^i|}\frac{(p_1^f)^2}{(2\pi)^2}\frac{|T_{fi}|^2}{\dfrac{p_1^f}{m_1}+\dfrac{p_1^f-P_i\cos\theta}{m_2}} \tag{5.6.20}
$$

选择质心系,会使上述公式更为简便. 如图 5.14 所示,在质心系中有

$$
\boldsymbol{P}_i=\boldsymbol{P}_f=0
$$

$$
\boldsymbol{p}_2^i=-\boldsymbol{p}_1^i,\quad \boldsymbol{p}_2^f=-\boldsymbol{p}_1^f,\quad |\boldsymbol{p}_1^f|=|\boldsymbol{p}_1^i| \tag{5.6.21}
$$

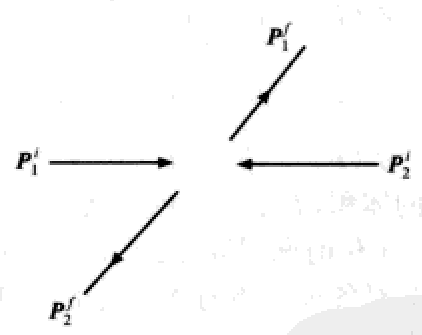


图 5.14

因此

$$
|\boldsymbol{v}_1^i-\boldsymbol{v}_2^i|=\left|\frac{\boldsymbol{p}_1^i}{m_1}-\frac{\boldsymbol{p}_2^i}{m_2}\right|=\left|\frac{\boldsymbol{p}_1^i}{m_1}+\frac{\boldsymbol{p}_1}{m_2}\right|=\frac{p_1^i}{\mu} \tag{5.6.22}
$$

于是(5.6.20)式成为

$$
\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_{1f}^{CM}}=\frac{\mu}{p_1^i}\frac{(p_1^i)^2}{(2\pi)^2}\frac{|T_{fi}|^2}{\dfrac{p_1^i}{m_1}+\dfrac{p_1^i-0}{m_2}}
$$

$$
=\frac{\mu^2}{(2\pi)^2}|T_{fi}|^2 \tag{5.6.23}
$$

或

$$
f_k=-\frac{\mu}{2\pi}T_{fi} \tag{5.6.24}
$$

不过,以上的讨论只是为了计算方便才在质心系中进行,要与实验对照仍需回到实验坐标系. 这时有

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_{1f}^{F}}=\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_{1f}^{CM}}\frac{\mathrm{d}\Omega_{1f}^{CM}}{\mathrm{d}\Omega_{1f}^{F}} \tag{5.6.25}$$

为此只需将(5.6.23)式的结果乘上两坐标系间的立体角元的关系即可. 注意,在上式中为了清楚标明是在什么样的坐标系中得到的微分散射截面,将(5.6.23)式 $\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_{1f}}$ 改写成了 $\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_{1f}^{CM}}$,而左方的实验坐标系的微分散射截面表示成 $\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_{1f}^{F}}$.

5.6.4 全同粒子的散射

(a) 前面的两粒子散射都是指的两种不同的粒子. 如果是两个全同的粒子散射,那么由于有全同性原理会带来什么样的新规律呢? 可从图5.15来看非全同粒子与全同粒子散射之间的差别何在:(i) 如两粒子不是全同粒子,则散射时如图所示,$f_k(\theta)$ 与 $f_k(\pi-\theta)$ 是不同的散射结果,因为两者对应于接收到的粒子是不同的粒子. (ii) 如是全同粒子,则应把 $f_k(\theta)$ 与 $f_k(\pi-\theta)$ 合起来作为统一的散射几率幅,因为这时两种结果看到的是不可区分的同一种粒子. 所以,在不同粒子散射时有

$$\begin{aligned}\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_1&=|f_k(\theta)|^2\\ \left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_2&=|f_k(\pi-\theta)|^2\end{aligned} \tag{5.6.26}$$

而在全同粒子的情形下

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=|f_k(\theta)+f_k(\pi-\theta)|^2 \tag{5.6.27}$$

下面分别对两种全同粒子——玻色子和费米子加以讨论.

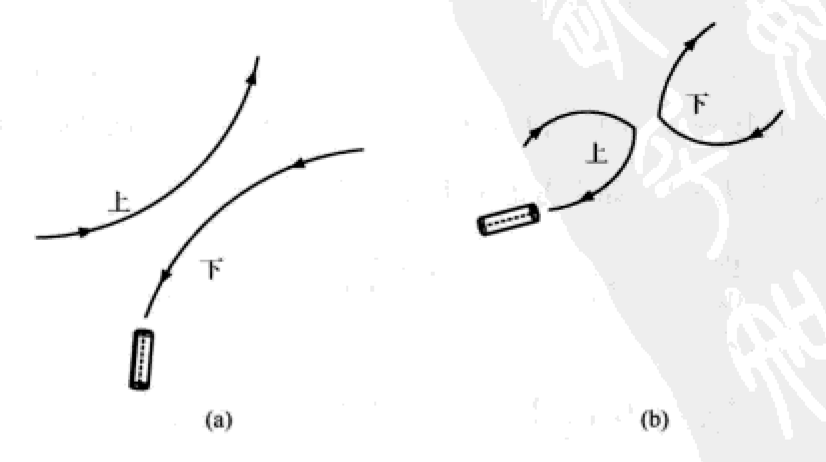


图5.15

(b) 全同玻色子的散射.

对应于 $f_k(\theta)$ 的直接散射的费曼图如下(见图5.16):

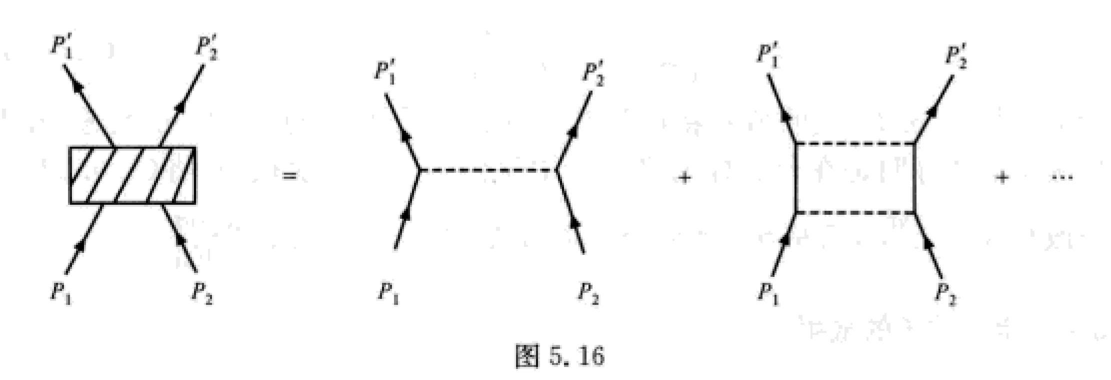


图 5.16

而对应于 $f_k(\pi-\theta)$ 的交换散射的费曼图如下(见图 5.17)：

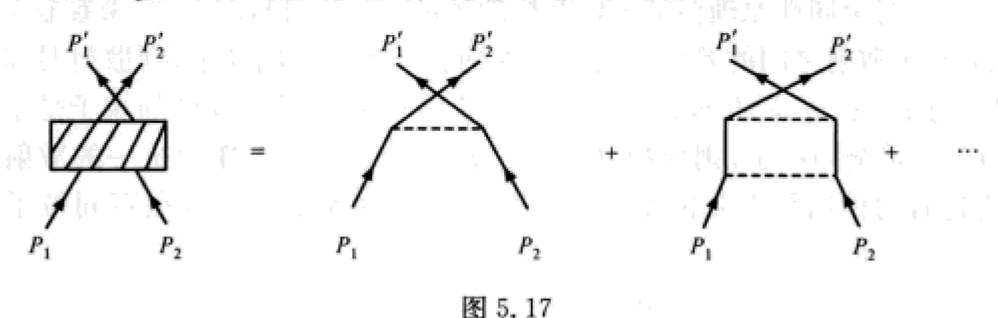


图 5.17

上述的全同玻色粒子散射的理论分析结果可以用低能 α 粒子的散射实验来验证. 因为低能 α 粒子的能量低，它们在散射中由于库仑排斥作用的存在使得散射时距离无法很接近，因此存在于它们之间的短程核力不起作用. 换句话说，不需要考虑传递核力的中介粒子. 这时 α 粒子间只有库仑相互作用的势散射，因此目前的理论是适用的，故有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}&=|f_k(\theta)+f_k(\pi-\theta)|^2\\&=|f_k(\theta)|^2+|f_k(\pi-\theta)|^2+2\mathrm{Re}\,f_k^*(\theta)f_k(\pi-\theta)\end{aligned}\tag{5.6.28}$$

这样的结果和直接将 $|f_k(\theta)|^2$ 和 $|f_k(\pi-\theta)|^2$ 加起来多了后面的干涉项，特别是 $\theta=\frac{\pi}{2}$ 时的散射尤为突出. 如不考虑无干涉项，这时

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\left|f_k\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2+\left|f_k\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2=2\left|f_k\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2\tag{5.6.29}$$

考虑了干涉项时，有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}&=\left|f_k\left(\frac{\pi}{2}\right)^2\right|+\left|f_k\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2+2\left|f_k\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2\\&=4\left|f_k\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2\end{aligned}\tag{5.6.30}$$

比较(5.6.29)和(5.6.30)式的结果可知，正确考虑了全同性原理得到的微分散射截面比不考虑时得到的微分散射截面大一倍，实验肯定了(5.6.30)式的结论.

下面为了分清全同玻色子和全同费米子在散射时的不同之处，准备从波函数的角度来讨论，因为从波函数来看两者的差异表现得最清楚.

(i) 首先回忆一下两种不同的粒子的散射，如图 5.18所示，采取在质心系中讨论.

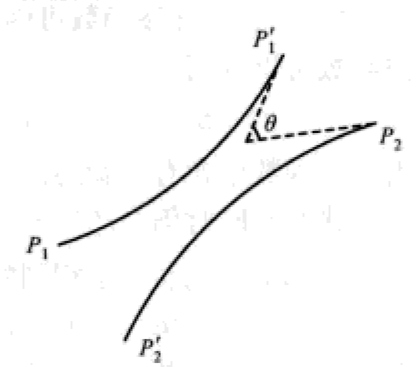


图 5.18

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\rightarrow\Psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})$$

其中

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}&=\frac{1}{2}(\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_2)\\ \boldsymbol{r}&=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2\end{aligned}\qquad(5.6.31)$$

在质心系中两粒子系统的运动，如前所述，分成质心运动与相对运动两部分. 质心运动不受散射的影响，这部分取平面波的形式；相对运动是散射问题，故总的波函数由如下的两部分组成

$$\Psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})=\exp[\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{R}]\cdot\Psi^{+}(\boldsymbol{r})\qquad(5.6.32)$$

其中 $\Psi^{+}(\boldsymbol{r})$ 又可分为向前的平面波及散射波两部分.

$$\Psi^{+}(\boldsymbol{r})\underset{r\to\infty}{\sim}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}+\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}f_k(\theta)\qquad(5.6.33)$$

将入射方向取作 z 方向，因此有 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(z_1-z_2)}$

以及 $\boldsymbol{p}_1$ 沿 z 方向， $\boldsymbol{p}_2$ 沿 $-z$ 方向.

$\boldsymbol{p}_1'$沿 θ 方向， $\boldsymbol{p}_2'$沿 $\pi-\theta$ 方向.

(ii) 考虑全同玻色子散射波函数应对称化

$$\begin{aligned}\psi&\sim\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)+\psi(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1)\\ &\sim\psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})+\psi(\boldsymbol{R},-\boldsymbol{r})\\ &=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}}[\psi^{(+)}(\boldsymbol{r})+\psi^{(+)}(-\boldsymbol{r})]\end{aligned}$$

对于 $\psi(-\boldsymbol{r})$：

$$z=z_2-z_1$$

$\boldsymbol{p}_1$ 沿 $-z$ 方向，$\boldsymbol{p}_2$ 沿 z 方向.

$\boldsymbol{p}'_1$沿 $\pi-\theta$ 方向，$\boldsymbol{p}'_2$沿 θ 方向.

因此

$$\psi^{(+)}(-\boldsymbol{r})=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz}+\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}f_k(\pi-\theta)\qquad(5.6.34)$$

即

$$\psi^{(+)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})\underset{r\to\infty}{\sim}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz}+\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}[f_k(\theta)+f_k(\pi-\theta)]\qquad(5.6.35)$$

得到和前面一样的结论.

(c) 全同费米子散射. 和玻色子的不同之处来自两个因素：一是波函数是反对

称的，二是有半整数自旋，一般常见的是自旋$\frac{1}{2}$的粒子. 假定粒子之间的相互作用与自旋无关，因此波函数可因式化，即这时波函数含的两部分，空间波函数和自旋波函数可以分离

$$\Phi(1,2)=\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\mid\chi_1\rangle\mid\chi_2'\rangle-\psi(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1)\mid\chi_1'\rangle\mid\chi_2\rangle \tag{5.6.36}$$

由于波函数中含有自旋的部分，虽然假定它与作用无关，但由于有全同性原理，自旋态状况不同时仍会产生不同的影响.

(i) 如$|\chi\rangle$与$|\chi'\rangle$是相同的自旋态，例如都是$|\downarrow\rangle$，则有

$$\Phi(1,2)=[\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)-\psi(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1)]\mid\downarrow_1\rangle\mid\downarrow_2\rangle \tag{5.6.37}$$

和全同的玻色子散射波函数比较，除多了附加的自旋态$|\downarrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle$以外，空间波函数部分是反对称的，故可立即写出

$$\Phi(1,2)\underset{r\to\infty}{\sim}\exp[\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{R}]\mid\downarrow_1\rangle\mid\downarrow_2\rangle\cdot\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz}+\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}[f_k(\theta)-f_k(\pi-\theta)]\right] \tag{5.6.38}$$

得出

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}&=\mid f_k(\theta)-f_k(\pi-\theta)\mid^2\\&=\mid f_k(\theta)\mid^2+\mid f_k(\pi-\theta)\mid^2-2\mathrm{Re}\,f_k^*(\theta)f_k(\pi-\theta)\end{aligned} \tag{5.6.39}$$

和全同玻色子散射不同之处在于

$$\theta=\frac{\pi}{2}\text{ 时}\quad\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\Big|_{\frac{\pi}{2}}=0.$$

这就是说当全同的两费米子散射时，如它们的自旋态相同，它们在$\theta=\frac{\pi}{2}$方向上完全没有散射.

(ii) 如两粒子的自旋态是相互正交的，例如一个向上、一个向下，这时

$$\Phi(1,2)=\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\mid\uparrow_1\rangle\mid\downarrow_2\rangle-\psi(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1)\mid\downarrow_1\rangle\mid\uparrow_2\rangle \tag{5.6.40}$$

进一步地

$$\begin{aligned}\Phi(1,2)\underset{r\to\infty}{\sim}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\boldsymbol{R}}\Big\{&\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}+\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}f_k(\theta)\right]\mid\uparrow_1\rangle\mid\downarrow_2\rangle\\&-\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}+\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}f_k(\pi-\theta)\right]\mid\downarrow_1\rangle\mid\uparrow_2\rangle\Big\}\end{aligned} \tag{5.6.41}$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}&=\langle\psi_s\mid\psi_s\rangle\\&=\mid f_k(\theta)\mid^2\langle\uparrow_1\mid\langle\downarrow_2\mid\uparrow_1\rangle\mid\downarrow_2\rangle+\mid f_k(\pi-\theta)\mid^2\langle\downarrow_1\mid\langle\uparrow_2\mid\downarrow_1\rangle\mid\uparrow_2\rangle\\&\quad-2\mathrm{Re}\,f_k^*(\theta)\,f_k(\pi-\theta)\langle\uparrow_1\mid\langle\downarrow_2\mid\mid\downarrow_1\rangle\mid\uparrow_2\rangle\\&=\mid f_k(\theta)\mid^2+\mid f_k(\pi-\theta)\mid^2\end{aligned} \tag{5.6.42}$$

得到的结果和没有干涉项的全同玻色子散射相同. 可以看出,在费米子的情况下,尽管相互作用势和自旋无关,但散射的结果仍和自旋状态有密切的关系. 如果两粒子的自旋状态既不完全相同又不完全正交,则这时要将它们都展开成向上和向下的两部分,再依自旋相同和相互正交的情形去分别计算后再合成.

第6章　粒子的电磁作用

前面讨论粒子受外势作用和粒子间相互作用时都是只作了原理性的阐述，并未与粒子间的具体相互作用联系起来. 自然界中已知的基本相互作用虽然有若干种，但在原子分子范围内主要的是电磁相互作用，所以在这一章里将着重讨论粒子间的电磁作用. 过去已经发展出了系统的原子、分子理论以及物质的光学、电磁性质的理论. 随着研究的深入，更多的有关电磁作用的新现象和新规律不断被发现，因此本章的内容除了给出物质中电磁作用的基本规律外，也要介绍一些与物质中电磁相互作用有关的新成果.

6.1　荷电粒子的拉格朗日量

6.1.1　最小作用量原理

为了讨论电磁作用的基本规律，首先回顾一下最小作用量原理. 如一个系统的拉格朗日量是 $L(\boldsymbol{x},\dot{\boldsymbol{x}},t)$，则该系统的作用量 S 定义为对它的时间积分

$$S=\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}tL(\boldsymbol{x},\dot{\boldsymbol{x}},t) \tag{6.1.1}$$

系统的运动方程由作用量的变分为零决定，即

$$\begin{aligned}\delta S&=\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t[L(\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{x},\dot{\boldsymbol{x}}+\delta\dot{\boldsymbol{x}},t)-L(\boldsymbol{x},\dot{\boldsymbol{x}},t)]\\&=\int_{t_1}^{t_2}\left[\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{x}}\cdot\delta\boldsymbol{x}+\frac{\partial L}{\partial\dot{\boldsymbol{x}}}\cdot\delta\dot{\boldsymbol{x}}\right]=0\end{aligned} \tag{6.1.2}$$

轨道的初、末点是固定的

$$\boldsymbol{x}(t_1)=\boldsymbol{x}_1,\quad \boldsymbol{x}(t_2)=\boldsymbol{x}_2 \tag{6.1.3}$$

因此两端点的变分为零

$$\delta\boldsymbol{x}(t_1)=\delta\boldsymbol{x}(t_2)=0 \tag{6.1.4}$$

将(6.1.2)式的第二项作分部积分，得

$$0=\delta S=\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\delta\boldsymbol{x}\cdot\left(\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{x}}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\dot{\boldsymbol{x}}}\right)+\delta\boldsymbol{x}\cdot\frac{\partial L}{\partial\dot{\boldsymbol{x}}}\bigg|_{t_1}^{t_2}=\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\delta\boldsymbol{x}\cdot\left(\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{x}}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\dot{\boldsymbol{x}}}\right) \tag{6.1.5}$$

由于变分 $\delta\boldsymbol{x}(t)$ 是任意的，所以从作用量的变分为零导出系统满足的运动方程为

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{x}} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}} = 0 \tag{6.1.6}$$

例如,一个粒子在势场中运动时,其拉格朗日量为

$$L = T - V = \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{x}}^2 - V(\boldsymbol{x}) \tag{6.1.7}$$

由上式得

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}} = m\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{p}, \quad \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{x}} = -\nabla V(\boldsymbol{x}) \tag{6.1.8}$$

代入(6.1.6)式便得到熟知的粒子运动方程

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = -\nabla V(\boldsymbol{x}) \tag{6.1.9}$$

6.1.2　相对论性粒子的哈密顿量

现在讨论一个相对论性粒子的哈密顿量,看它应当是什么样的形式.

这时首先要把(6.1.1)式对 t 的积分换成是标量的固有时的积分. 回忆一下相对论的基本关系式,即固有时 τ 与四维坐标$(t,\boldsymbol{x})$之间的关系(取 $c=1$)

$$\mathrm{d}\tau = \sqrt{\mathrm{d}t^2 - \mathrm{d}\boldsymbol{x}^2} = \mathrm{d}t\sqrt{1-\dot{\boldsymbol{x}}^2} \tag{6.1.10}$$

记

$$\gamma \equiv \frac{1}{\sqrt{1-\dot{\boldsymbol{x}}^2}} \tag{6.1.11}$$

有

$$\mathrm{d}t = \gamma \mathrm{d}\tau \tag{6.1.12}$$

根据以上的关系可将作用量写作

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}tL = \int_{\tau_1} \mathrm{d}\tau(\gamma L) \tag{6.1.13}$$

现在再从相对论的协变性要求来看 L 应该取什么样的形式. 考虑如下:

(a) 相对论协变性要求 S 应当是标量,$\mathrm{d}\tau$ 也是标量,所以要求 γL 也应是标量,才能保证运动方程在所有惯性系中取同一形式.

(b) 这一标量应由基本量 x^μ,p^μ 所组成,但在讨论自由粒子的情形下四度时空具有平移的变性,即运动方程对变换 $x^\mu \to x^\mu + a^\mu$ 不变,所以 γL 不能含 x^μ 而只能是 $p^\mu p_\mu = m^2$(标量)的函数,即

$$\gamma L = f(m) \tag{6.1.14}$$

根据以上的考虑,得到自由运动粒子的相对论性作用量是

$$S = \int_{\tau_1}^{\tau_2} \mathrm{d}\tau f(m) = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t f(m)\sqrt{1-\dot{\boldsymbol{x}}^2} \tag{6.1.15a}$$

由此可见

$$L = f(m)\sqrt{1-\dot{\boldsymbol{x}}^2} \tag{6.1.15b}$$

代入运动方程

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}} - \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}} \\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}} f(m)\sqrt{1-\dot{\boldsymbol{x}}^2}\right) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[f(m)\gamma\dot{\boldsymbol{x}}] \end{aligned} \tag{6.1.16}$$

上式的第二等式中考虑到 L 不含 $\boldsymbol{x}$，故有$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{x}}=0$，由上式知$[-f(m)\gamma\dot{\boldsymbol{x}}]$应是守恒量.另一方面，已知相对论性动量 $m\gamma\dot{\boldsymbol{x}}$ 是守恒量，两者比较得 $f(m)=-m$，再代入(6.1.15b)式便得

$$L = -m\sqrt{1-\dot{\boldsymbol{x}}^2} = -\frac{m}{\gamma} \tag{6.1.17}$$

在非相对论的极限下得到

$$L = -m + \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{x}}^2 + \cdots \tag{6.1.18}$$

上式中的第二项正是非相对论性自由粒子的拉格朗日量，由此验证了上面讨论结果的正确性.

6.1.3　电磁场中运动粒子的拉格朗日量

表征电磁场的物理量是电磁场强，也可以是四度的电磁势 $A^\mu=(\varphi,\boldsymbol{A})$. 拉格朗日量应当是一个标量，所以粒子与电磁场耦合的可能形式是$\frac{e}{m}P\cdot A$. 以下讨论取这种形式的合理性.

(a) $P=(E,\boldsymbol{p})$也是四矢量，所以 $P\cdot A$ 是标量，同时该量应和粒子的电荷 e 成正比.

(b) 看一下它在非相对论极限下的情况，所谓非相对论极限指粒子的速度很小($u\to 0$)，于是有$\frac{e}{m}P\cdot A=\frac{e}{m}(E\varphi-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A})\xrightarrow[u\to 0]{}\frac{e}{m}(m\varphi)=e\varphi$，从而得到了静止粒子在非相对论情形的静电势下的拉格朗日量.

(c) 详尽一点说，有了电磁场后，整个的 γL(不变量)应为

$$\begin{aligned} L &= -\frac{m}{\gamma} - \frac{e}{\gamma m}(E\varphi - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}) \\ &= -m\sqrt{1-\dot{\boldsymbol{x}}^2} - \frac{e\varphi E}{m}\frac{\mathrm{d}\tau}{\mathrm{d}t} + e\frac{\mathrm{d}\tau}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t}\cdot\boldsymbol{A} \end{aligned} \tag{6.1.19}$$

其中利用了关系

$$\gamma = \frac{dt}{d\tau}$$

回忆一下，在非相对论极限下有

$$\frac{d\tau}{dt} \approx 1,\ |\dot{\boldsymbol{x}}| \ll 1, \frac{E}{m} \approx 1$$

因此(6.1.19)式成为

$$\begin{aligned} L &= -\frac{m}{\gamma} - \frac{e}{\gamma m}(E\varphi - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}) \\ &= -m\sqrt{1-\dot{\boldsymbol{x}}^2} - \frac{E}{m}e\varphi\frac{d\tau}{dt} + e\frac{d\tau}{dt}\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}\cdot\boldsymbol{A} \\ &\to -m + \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{x}}^2 - e\varphi + e\dot{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{A} \end{aligned} \tag{6.1.20}$$

得出了非相对论极限下粒子的动能、静电势及与矢势的作用. 不过要注意的是，虽然取的是非相对论极限，但并不是把 u 就取为零，所以得到的结果也包括了粒子与矢量势的作用，这就是比(b)考虑得更仔细的地方.

(d) 将在非相对论极限下得出的 L(6.1.20)式代入运动方程

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{\boldsymbol{x}}} - \frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{x}} = \frac{d}{dt}(m\dot{\boldsymbol{x}} + e\boldsymbol{A}) - \frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\left(-e\varphi + e\sum_{i=1}^{3}\dot{x}_i A_i\right) = 0 \tag{6.1.21}$$

注意在有电磁场时粒子的正则动量是

$$\boldsymbol{p} = \frac{\partial L}{\partial\dot{\boldsymbol{x}}} = m\dot{\boldsymbol{x}} + e\boldsymbol{A} \tag{6.1.22}$$

所以(6.1.21)式又可表示成

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = -e\nabla\varphi + e\sum_i \dot{x}_i\nabla A_i \tag{6.1.23}$$

由于

$$\frac{d\boldsymbol{A}}{dt} = \frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial x_i}\dot{x}_i = \frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t} + (\dot{\boldsymbol{x}}\cdot\nabla)\boldsymbol{A} \tag{6.1.24}$$

以及 $\boldsymbol{p}$ 的(6.1.22)式表示，因此(6.1.23)式可改写为

$$\begin{aligned} \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} &= \frac{d}{dt}(m\dot{\boldsymbol{x}} + e\boldsymbol{A}) = \frac{d}{dt}(m\dot{\boldsymbol{x}}) + e\frac{d\boldsymbol{A}}{dt} = m\frac{d\dot{\boldsymbol{x}}}{dt} + e\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t} + e(\dot{\boldsymbol{x}}\cdot\nabla)\boldsymbol{A} \\ &= -e\nabla\varphi + e\sum_i\dot{x}_i\nabla A_i \end{aligned}$$

即

$$\begin{aligned} m\frac{d\dot{\boldsymbol{x}}}{dt} &= e\left(-\nabla\varphi - \frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}\right) + e\left[\sum_i\dot{x}_i\cdot\nabla A_i - (\dot{\boldsymbol{x}}\cdot\nabla)\boldsymbol{A}\right] \\ &= e\left(-\nabla\varphi - \frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}\right) + e\dot{\boldsymbol{x}}\times(\nabla\times\boldsymbol{A}) = e(\boldsymbol{E} + \dot{\boldsymbol{x}}\times\boldsymbol{B}) \end{aligned} \tag{6.1.25}$$

最后得到了具有正确洛仑兹力的粒子运动公式，从而验证了电磁场中粒子的拉格

朗日量表示(6.1.19)式的正确性.

6.1.4 哈密顿量

在量子理论中常需用到系统的哈密顿量算符.为了便于作量子理论的讨论,所以从系统的拉格朗日量出发去导出相应的哈密顿量.由于现在讨论的是非相对论性的量子理论,所以应当从非相对论极限下的 L 出发求 H

$$
\begin{aligned}
H &= \dot{\boldsymbol{x}}\cdot\frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}} - L = \dot{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{p} - L \\
&= \dot{\boldsymbol{x}}\cdot(m\dot{\boldsymbol{x}} + e\mathbf{A}) - \left(-m + \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{x}}^2 + e\varphi - e\dot{\boldsymbol{x}}\cdot\mathbf{A}\right) \\
&= m + \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{x}}^2 + e\varphi \\
&= m + \frac{(\boldsymbol{p} - e\mathbf{A})^2}{2m} + e\varphi
\end{aligned}
\tag{6.1.26}
$$

上式中的常量 m 可以省去,后面两项就是常见的粒子与电磁场耦合系统的哈密顿量,不过需留意的是这里还没有包括裸电磁场的部分.

6.2 规范不变性

6.2.1 麦克斯韦方程

现在转而讨论用场强表示的麦克斯韦方程:

$$
\begin{aligned}
&\nabla\cdot\boldsymbol{E} = \rho \\
&\nabla\times\boldsymbol{B} - \frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t} = \boldsymbol{j} \\
&\nabla\cdot\boldsymbol{B} = 0 \\
&\nabla\times\boldsymbol{E} + \frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} = 0
\end{aligned}
\tag{6.2.1}
$$

其中 $\rho,\boldsymbol{j}$ 是电荷密度及电流密度.由于(6.2.1)式是三维空间的表示,掩盖了电磁规律的相对论协变性,为此需将$(\boldsymbol{E},\boldsymbol{B})$写成一个四度的二阶反对称张量的形式

$$
F^{\mu\nu} = \begin{bmatrix} 0 & E_1 & E_2 & E_3 \\ -E_1 & 0 & -B_3 & B_2 \\ -E_2 & B_3 & 0 & -B_1 \\ -E_3 & -B_2 & B_1 & 0 \end{bmatrix} \tag{6.2.2}
$$

以及将 $\rho,\boldsymbol{j}$ 组成四矢量形式

$$
j^\mu = (\rho,\boldsymbol{j}) \tag{6.2.3}
$$

当然仅仅是形式上把一些物理量写成四度形式并没有实质的相对论协变性的意义，但如果能将麦克斯韦方程(6.2.1)式改写成具有协变性的方程形式，才会实质上满足协变性要求

(a) 很容易看出，麦克斯韦方程(6.2.1)式的第一式及第二式可以改写成如下协变的矢量方程

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = j^\nu \tag{6.2.4}$$

其中

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \nabla\right)$$

(b) (6.2.1)式的第三、第四式也可改写成另一个协变的矢量方程

$$\partial_\mu F^{*\mu\nu} = 0 \tag{6.2.5}$$

其中

$$F^{*\mu\nu} \equiv \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} F_{\alpha\beta} \tag{6.2.6}$$

综合以上的结果可看出麦克斯韦方程实质上是相对论协变的.

(c) 在作洛仑兹变换

$$x^\mu \to x'^\mu = \sum_{\nu=0}^{3} a^\mu_\nu x^\nu \tag{6.2.7}$$

的时候，四度流密度矢量变换如下

$$j^\mu \to j'^\mu = \sum_{\nu=0}^{2} a^\mu_\nu j^\nu \tag{6.2.8}$$

二阶电磁场张量变换如下

$$F^{\mu\nu} \to F'^{\mu\nu} = \sum_{\alpha,\beta=0}^{3} a^\mu_\alpha a^\gamma_\beta F^{\alpha\beta} \tag{6.2.9}$$

(d) 由于张量 $F^{\mu\nu}$ 具有反对称性，所以对(6.2.4)式两端作微商可以直接得到连续性方程

$$\partial_\nu j^\nu = \partial_\mu \partial_\nu F^{\mu\nu} = 0 \tag{6.2.10}$$

对上面的连续性方程作体积分得

$$\int_V \left(\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j}\right) \mathrm{d}^3 r = 0$$

即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} Q = -\int \nabla \cdot \boldsymbol{j}\, \mathrm{d}^3 r = -\int_{\text{表面}} \boldsymbol{j} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{6.2.11}$$

其中

$$Q = \int_V \rho\, \mathrm{d}^3 r$$

当取 V 为全空间时，得(6.2.11)式的右方 $\int_{\infty\text{面}} \boldsymbol{j} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} = 0$. 这是因为无穷远处 $\boldsymbol{j}$ 一

定为零,这一结果保证了全空间的电荷守恒.

6.2.2 麦克斯韦方程的矢量势形式

引入四度的矢量势

$$A^\mu = (\varphi, \boldsymbol{A}) \tag{6.2.12}$$

将 $F^{\mu\nu}$ 用它来表示

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \tag{6.2.13}$$

用场强来表示是

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}$$

$$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$$

(a) 由于 $\varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta}$ 是全反称的,故有

$$\varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta}\partial_\alpha\partial_\beta = 0$$

因此自然得到麦克斯韦方程组中的(6.2.5)式

$$\begin{aligned}\partial_\mu F^{*\mu\nu} &= \partial_\mu[\varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta}(\partial^\alpha A^\beta - \partial^\beta A^\alpha)] \\ &= \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta}(\partial_\mu\partial^\alpha A^\beta - \partial_\mu\partial^\beta A^\alpha) = 0\end{aligned}$$

(b) 剩下唯一的四矢量势应满足的方程(6.2.4)可改写为

$$\begin{aligned}\partial_\mu F^{\mu\nu} &= \partial_\mu(\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) \\ &= \Box A^\nu - \partial^\nu(\partial_\mu A^\mu) = j^\nu\end{aligned}$$

其中引入

$$\Box \equiv \partial_\mu \partial^\mu \tag{6.2.14}$$

注意如下的关系

$$\partial_\mu = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \nabla\right)$$

$$\partial^\mu = \eta^{\mu\nu}\partial_\nu = \left(\frac{\partial}{\partial t}, -\frac{\partial}{\partial x^1}, -\frac{\partial}{\partial x^2}, -\frac{\partial}{\partial x^3}\right)$$

其中

$$\eta^{\mu\nu} = \begin{bmatrix} +1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{bmatrix}$$

6.2.3 规范不变性

上面引入的四矢量势具有一定的任意性,因为如果 A^μ 是正确表示场强的二阶张量的四矢量势的话,那么对 A^μ 作如下的规范变换

$$A'^{\mu} = A^{\mu} + \partial^{\mu}\chi \tag{6.2.15}$$

χ 是一个标量,则由 A'^{μ} 得到的 $F'^{\mu\nu}$ 和原来的 $F^{\mu\nu}$ 一样

$$\begin{aligned} F'^{\mu\nu} &= \partial^{\mu}A^{\nu} - \partial^{\nu}A^{\mu} + (\partial^{\mu}\partial^{\nu} - \partial^{\nu}\partial^{\mu})\chi \\ &= \partial^{\mu}A^{\nu} - \partial^{\nu}A^{\mu} = F^{\mu\nu} \end{aligned} \tag{6.2.16}$$

可见经过(6.2.15)式的规范变换后的 A'^{μ} 仍然给出同一个 $F^{\mu\nu}$,这种性质叫做规范变换的不变性.

要想去掉这种任意性,可以给 A^{μ} 加上一定的条件,例如可以选择χ使它满足

$$\chi = -\partial_{\mu}A^{\mu} \tag{6.2.17}$$

经过这样的(6.2.15)式变换后的 A'^{μ} 就满足

$$\partial_{\mu}A'^{\mu} = \partial_{\mu}A^{\mu} + \partial_{\mu}\partial^{\mu}\chi = \partial_{\mu}A^{\mu} + \chi = 0 \tag{6.2.18a}$$

把 A'^{μ} 的撇号去掉,写成

$$\partial_{\mu}A^{\mu} = 0 \tag{6.2.18b}$$

上述的对矢量势的这个约束条件叫洛仑兹规范,把它代入(6.2.14)式后得到在洛仑兹规范条件下的麦克斯韦方程为

$$\Box A^{\mu} = j^{\mu} \tag{6.2.19}$$

这就是说利用规范不变性可以给矢量势加上一个如(6.1.18b)式规定的性质. 值得注意的是,尽管有了规范条件,例如选取洛仑兹规范,四矢量势仍然没有完全确定下来,因为如果 A^{μ} 满足(6.2.18a)式,那么另一个 A'^{μ}

$$A'^{\mu} = A^{\mu} + \partial^{\mu}\eta \tag{6.2.20}$$

只要 η 满足

$$\Box\eta = 0 \tag{6.2.21}$$

则 A'^{μ} 也一样满足(6.2.18b)式. 当然现在的任意性终归要比原来的小了一些.

6.2.4　量子理论的规范不变性

前面讲的规范不变性都是在经典理论的框架下进行的. 现在要问在量子理论的框架下这种规范不变性是否仍然成立. 在量子理论中,动力学方程是如下的薛定谔方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi = \left[\frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\nabla - e\mathbf{A})^2 + e\Phi\right]\psi \tag{6.2.22}$$

如果在量子理论中这种规范不变性仍然成立的话,那么在 A^{μ} 作了(6.2.15)式的规范变换后,(6.2.22)式的形式就应当不变. 不过在检验(6.2.22)式的形式是否不变之前,应当注意到另一个重要的因素,那就是在量子理论中四矢量势是作为算符进入到系统的哈密顿量中去的. 但是量子理论中还有另一要素波函数,因此我们自然要问在算符作变换时,波函数是否也要作相应的变换才能使动力学方程在总的

变换后形式不变呢？答案是在量子理论的规范变换中，波函数自然也应作相应的变换，即在量子理论中总的规范变换应是算符和波函数的同步变换

$$A'^{\mu} = A^{\mu} + \partial^{\mu}\chi, \quad \psi' = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\psi \tag{6.2.23}$$

下面就来证明在规范变换(6.2.23)式下，薛定谔方程(6.2.22)式的确保持形式不变，即在变换后仍是

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi' = \left[\frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\nabla - e\boldsymbol{A}')^2 + e\Phi'\right]\psi' \tag{6.2.24}$$

证明过程如下：

首先看(6.2.24)式的左方

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi' = \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\psi) = e\frac{\partial\chi}{\partial t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\psi + \mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{6.2.25}$$

再看(6.2.24)式的右方

$$\begin{aligned}
&\left[\frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\nabla - e\boldsymbol{A}')^2 + e\Phi'\right]\psi' \\
&= \left[\frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\nabla - e\boldsymbol{A} + e\nabla\chi)^2 + e\left(\Phi + \frac{\partial\chi}{\partial t}\right)\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\psi \\
&= \frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\nabla - e\boldsymbol{A} + e\nabla\chi)(-e\nabla\chi\mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\psi - \mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\nabla\psi - e\boldsymbol{A}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\psi \\
&\quad + e\nabla\chi\mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\psi) + e\left(\varphi + \frac{\partial\chi}{\partial t}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\psi \\
&= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\left[\frac{(-\mathrm{i}\nabla - e\boldsymbol{A})^2}{2m} + e\varphi\right]\psi + e\frac{\partial\chi}{\partial t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\psi \\
&= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\cdot\mathrm{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} + e\frac{\partial\chi}{\partial t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\psi
\end{aligned} \tag{6.2.26}$$

(6.2.25)和(6.2.26)两式的右方相等，故左方也相等. 这样就证明了规范变换后同样形式的薛定谔方程成立，即量子理论中仍然存在相应的规范变换不变性. 这里要附加说明两点：

(a) 在规范变换中波函数的变换为 $\psi' = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\psi$.

(b) 因此有 $|\psi'|^2 = |\psi|^2$，即在规范变换中粒子的几率分布不变. 看起来似乎这样的波函数规范变换不会有任何物理效应，但是不要忘记波函数一般是一个复数量，相因子同样会起着重要的作用. 从下面一小节的讨论中就将看到波函数的相因子如何产生物理效应.

6.3　Aharonov-Bohm 效应

Aharonov-Bohm 效应是一个很有意义的物理效应. 它在 20 世纪中期首先被从理论上预言,后来在实验中得到了证实. 这个被称之为 A-B 效应的物理现象说明了重要的两点:一是说明了波函数的相因子的重要性,二是改变了经典电磁理论中认为只有场强 $F^{\mu\nu}$ 才有实质的物理意义而四矢量势似乎只是一种辅助的数学工具的看法. 这种看法来源于四矢量势具有的规范变换的任意性. A-B 效应证实了四矢量势本身具有实质的物理意义. 为了阐明 A-B 效应,让我们先回顾一下电子的量子理论的双缝实验.

6.3.1　双缝实验

如前所述,电子穿过双缝不是沿确定轨道到达屏上,或者按路径积分的看法来讲它是沿无穷多根权重不同的路径到达屏上的,图 6.1 中标示出其中的主要贡献的经典轨道,而且事实上有显著贡献的是那些围绕经典轨道的无数条邻域的路径,不过由于它们都在经典轨道的邻域,所以其几率幅与相因子都可以由经典轨道主要来表征.

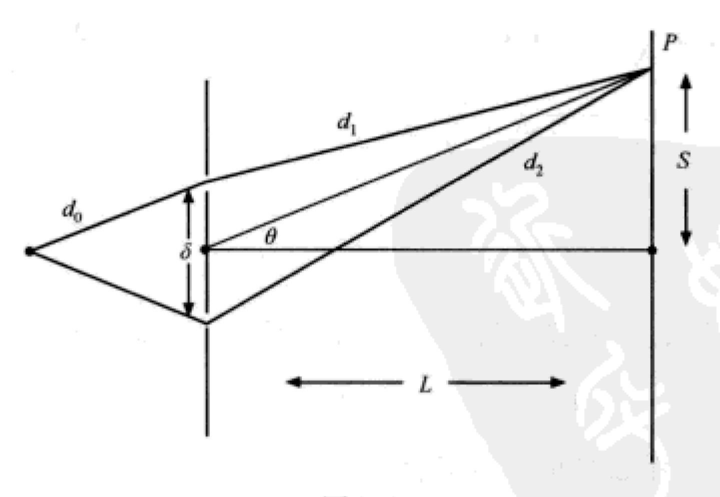


图 6.1

(a) 电子通过上缝到屏上 P 点时,它的相位与离开源时的相位差为

$$\exp\left(\mathrm{i}\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\,\frac{1}{2}m\,\dot{\boldsymbol{x}}^2\right)\sim\exp\left(\mathrm{i}\,\frac{2\pi d_0}{\lambda}+\mathrm{i}\,\frac{2\pi d_1}{\lambda}\right) \tag{6.3.1}$$

其中 λ 是德布罗意波长

$$\lambda=\frac{2\pi}{p}\simeq\frac{2\pi(t_2-t_1)}{m(d_0+d_1)} \tag{6.3.2}$$

(b) 电子沿下缝到达 P 点时起主要贡献的经典轨道的相位变化是

$$\exp\left(\mathrm{i}\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\,\frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{x}}^2\right)\sim\exp\left(\mathrm{i}\,\frac{2\pi d_0}{\lambda}+\mathrm{i}\,\frac{2\pi d_2}{\lambda}\right)\tag{6.3.3}$$

(c) 如记电子在离开源时的波函数为 ψ_0 到达屏时由于其相应的相位变化由(6.3.2)及(6.3.3)两式给出，其波函数分别应为

$$\begin{aligned}\psi_1&=\psi_0\exp\left(\mathrm{i}\,\frac{2\pi d_0}{\lambda}+\mathrm{i}\,\frac{2\pi d_1}{\lambda}\right)\\ \psi_2&=\psi_0\exp\left(\mathrm{i}\,\frac{2\pi d_0}{\lambda}+\mathrm{i}\,\frac{2\pi d_2}{\lambda}\right)\end{aligned}\tag{6.3.4}$$

于是屏上 P 点的波函数为

$$\psi=\psi_0\exp\left(\mathrm{i}\,\frac{2\pi d_0}{\lambda}+\mathrm{i}\,\frac{2\pi d_1}{\lambda}\right)\left[1+\exp\left(\mathrm{i}2\pi\,\frac{d_2-d_1}{\lambda}\right)\right]\tag{6.3.5}$$

因此到达屏上 P 点的几率(光强)为

$$\begin{aligned}|\psi|^2&=|\psi_0|^2\left[1+\exp\left(\mathrm{i}2\pi\,\frac{d_2-d_1}{\lambda}\right)\right]\left[1+\exp\left(-\mathrm{i}2\pi\,\frac{d_2-d_1}{\lambda}\right)\right]\\ &=4\,|\psi_0|^2\cos^2\frac{\pi(d_2-d_1)}{\lambda}\end{aligned}\tag{6.3.6}$$

(d) 由图 6.1 知 $L\gg S,\delta$，因此有

$$\begin{aligned}d_2&=\sqrt{L^2+\left(S+\frac{\delta}{2}\right)^2}\cong\sqrt{L^2+S^2}+\frac{S\delta}{2\sqrt{L^2+S^2}}\\ &=\sqrt{L^2+S^2}+\frac{\delta}{2}\sin\theta\end{aligned}$$

同理有

$$d_1\cong\sqrt{L^2+S^2}-\frac{\delta}{2}\sin\theta\tag{6.3.7}$$

将(6.3.7)式代入(6.3.6)式，得到电子在屏上激起的强度分布为

$$I(\theta)\sim|\psi|^2=4I_0\cos^2\pi\delta\,\frac{\sin\theta}{\lambda}\tag{6.3.8}$$

屏上形成的衍射花样如图 6.2(a)所示.

6.3.2　A-B 效应

在狭缝的后面放一根很长的细螺线管，如图 6.2(b)所示，管轴垂直于纸面，管的半径为 R.

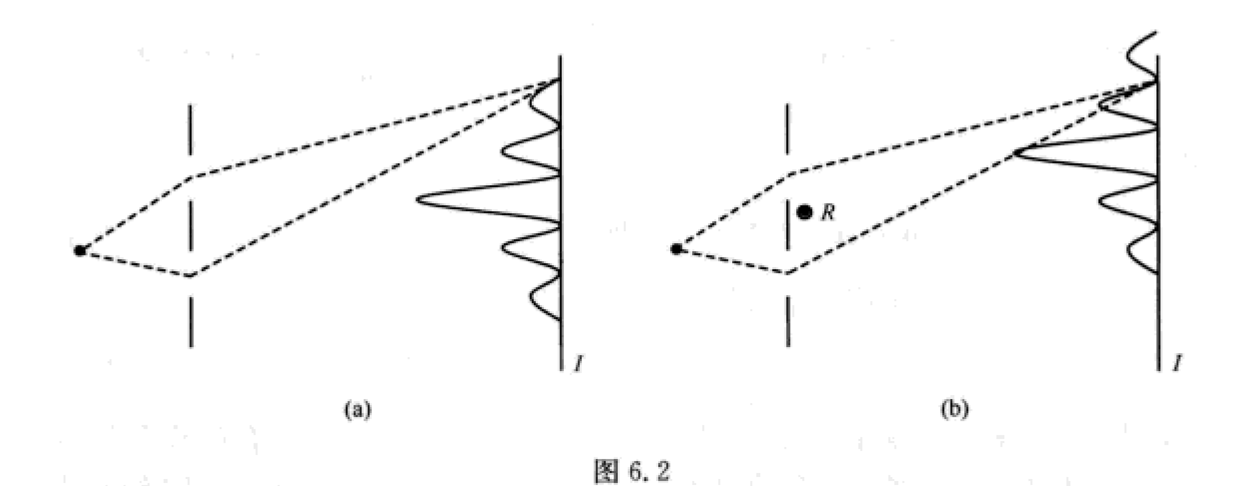


图 6.2

这时管内有场强 B 而管外场强为零. 如用矢量势来描述，有

$$\boldsymbol{A}=\begin{cases}\hat{n}\,\dfrac{1}{2}Br & r<R\\[2mm] \hat{n}\,\dfrac{1}{2}B\dfrac{R^2}{r} & r>R\end{cases}\tag{6.3.9}$$

其中 $\hat{n}$ 是纸面内与位置矢量 $\boldsymbol{r}$ 垂直的单位矢量.

可以证明(6.3.9)式给出的矢量势的表示式是正确的，因为由它给出

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=\hat{k}\,\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial r}(rA)=\begin{cases}\hat{k}\,\dfrac{1}{r}\,\dfrac{\partial}{\partial r}\left(\dfrac{1}{2}Br^2\right)=B\hat{k} & r<R\\[2mm] \hat{k}\,\dfrac{1}{r}\,\dfrac{\partial}{\partial r}\left(\dfrac{1}{2}BR^2\right)=0 & r>R\end{cases}\tag{6.3.10}$$

其中 $\hat{k}$ 是垂直纸面的单位矢量.

在加上螺线管后，我们再来看电子到达屏上的相因子变化，没有螺线管时，相因子的变化主要来自“经典轨道”的路径积分 $\exp\left(\mathrm{i}\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\,\frac{1}{2}m\,\dot{\boldsymbol{x}}^2\right)$. 有了产生螺线管内磁场的矢量势 $\boldsymbol{A}$ 后，相应的拉格朗日量变为

$$L=\frac{1}{2}m\,\dot{\boldsymbol{x}}^2+e\,\dot{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{A}\tag{6.3.11}$$

因此穿过上下缝的“经典轨道”的相因子变化分别变为

$$\exp\left[\mathrm{i}\int_{\text{上路径}}\left(\frac{1}{2}m\,\dot{\boldsymbol{x}}^2+e\boldsymbol{A}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t}\right)\mathrm{d}t\right]=\exp\left[\mathrm{i}\,\frac{2\pi}{\lambda}(d_0+d_1)+\mathrm{i}e\int_{\text{上路径}}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right]\tag{6.3.12}$$

$$\exp\left[\mathrm{i}\int_{\text{下路径}}\left(\frac{1}{2}m\,\dot{\boldsymbol{x}}^2+e\boldsymbol{A}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t}\right)\mathrm{d}t\right]=\exp\left[\mathrm{i}\,\frac{2\pi}{\lambda}(d_0+d_2)+\mathrm{i}e\int_{\text{下路径}}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right]\tag{6.3.13}$$

两个路径到达屏上时的相位差变为

$$\exp\left[\mathrm{i}2\pi\frac{d_2-d_1}{\lambda}+\mathrm{i}e\left(\int_{下}-\int_{上}\right)\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right]=\exp\left(\mathrm{i}2\pi\frac{d_2-d_1}{\lambda}+\mathrm{i}e\oint\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right) \tag{6.3.14}$$

其中

$$\oint\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}=\int\nabla\times\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}=\int\boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}=B\pi R^2 \tag{6.3.15a}$$

这时屏上电子的强度分布为

$$I(\theta)=4I_0x\cos^2\left(\frac{\pi\delta}{\lambda}\sin\theta+\frac{e}{2}B\pi R^2\right) \tag{6.3.15b}$$

表现为衍射花样向上推了一段. 从以上的讨论中我们得出以下几点有意思的结论：

(a) 上述的 A-B 效应清楚地说明了 $\boldsymbol{A}$ 确实有实际意义，因为在上、下"经典轨道"所经之处是没有场强的，但势 $\boldsymbol{A}$ 不为 0. 这是矢量势产生的物理效应.

(b) A-B 效应的根源在于在上、下路径上相因子变化的不同. 这说明了在量子理论中相因子所起的作用.

(c) 人们也许会提出这样的问题，因为 A-B 效应来自矢量势，但矢量势 $\boldsymbol{A}$ 是允许规范变换的，那么这个效应是否与规范的选取有关呢？如有，则它仍不是实质的. 只有当它与规范的选择无关时才是真正的物理效应. 下面将证明它的确与规范的选择无关. 在规范变换时

$$\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}+\nabla\chi \tag{6.3.16}$$

而

$$\begin{aligned}\oint(\boldsymbol{A}+\nabla\chi)\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}&=\oint\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}+\oint\nabla\chi\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\\&=\oint\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}+\int\nabla\times(\nabla\chi)\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}\\&=\oint\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\end{aligned} \tag{6.3.17}$$

这样就证明了 A-B 效应的确与规范的选择无关.

(d) 需要补充说明的是，以上都是围绕"经典轨道"来讨论的，所以它只突出了主要的定性性质，精确的讨论还应将所有路径都考虑在内.

6.4 电　磁　场

在前面讨论粒子与电磁场之间的作用时，对粒子一直用量子理论处理，而对电磁场还停留在用经典场处理的阶段，同时也没有讨论电磁场本身对哈密顿量的贡献. 为了进一步地深入讨论和构建一个完整的量子理论，我们应当把电磁场也量子化，即把电磁场看做是一个光子体系. 这时粒子与电磁场之间的作用和粒子与粒子

间的电磁作用便可看做是粒子与粒子通过光子中介而产生的相互作用. 但为了对电磁场进行量子化，首先还需要对电磁场的经典场论内容作深入一点的讨论，因为电磁场作为场和粒子体系有一个显著的不同之点，就是粒子具有有限的自由度 $\boldsymbol{x}(t)$ 而场 $A^\mu(x,t)$ 具有无限的自由度，所以需要就此作一些特别的讨论.

6.4.1　拉格朗日量密度

由于场 $A^\mu(\boldsymbol{x},t)$ 有无限的自由度，所以必须先引入它的拉格朗日量密度 $\lambda(\boldsymbol{x},t)$ 而不是直接就讨论拉格朗日量，因而作用量不再是直接表示为拉格朗日量对时间的积分，而是表示为拉格朗日量密度对时间及空间的积分

$$S=\int \mathrm{d}^4 x L(\boldsymbol{x},t) \tag{6.4.1}$$

为简明起见，以下的讨论以单分量的场 $\Phi(x)\equiv\Phi(\boldsymbol{x},t)$ 为例. 场的拉格朗日量密度一般既是 $\Phi(x)$ 的泛函，也是 $\partial_\mu\Phi(x)$ 的泛函，这时对作用量的变分既有来自场的变分 $\delta\Phi(x)$，也有来自 $\delta(\partial_\mu(\Phi(x)))$ 的变分，即

$$\delta S=\int \mathrm{d}^4 x\left[\frac{\partial L}{\partial \Phi}\delta\Phi(x)+\frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu\Phi)}\delta\partial_\mu\Phi(x)\right] \tag{6.4.2}$$

利用 $\delta\partial_\mu\Phi(x)=\partial_\mu\delta\Phi(x)$，并对上式右方第二项作分部积分并应用作用量原理

$$\begin{aligned}\delta S&=\int \mathrm{d}^4 x\left[\frac{\partial L}{\partial \Phi}\delta\Phi(x)-\partial_\mu\frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu\Phi)}\delta\Phi(x)\right]+\left[\frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu\Phi)}\delta\Phi\right]_{\infty\text{面}}\\&=\int \mathrm{d}^4 x\left[\frac{\partial L}{\partial \Phi}-\partial_\mu\frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu\Phi)}\right]\delta\Phi(x)=0\end{aligned} \tag{6.4.3}$$

由于 $\delta\Phi(x)$ 是任意的，所以得到如下的 $\Phi(x)$ 场应满足的运动方程

$$\frac{\partial L}{\partial \Phi}-\partial_\mu\frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu\Phi)}=0 \tag{6.4.4}$$

6.4.2　电磁场的拉格朗日量密度

上面导出的运动方程是普适的，它适用于各种场，包括电磁场. 已知电磁场的规律在洛仑兹时空变换下具有协变性，变换时新旧坐标间有如下的关系：

(a) $\mathrm{d}x'^0=\gamma^{-1}\mathrm{d}x^0\,|_{\mathrm{d}x=0}$，这是运动时钟变慢的效应. 下标 $\mathrm{d}x=0$ 表示旧坐标系中的时钟是静止的.

(b) $\mathrm{d}x'_\parallel=\gamma\mathrm{d}x_\parallel\,|_{\mathrm{d}x^0=0}$，这是洛仑兹长度收缩的效应，$x_\parallel$ 表示空间坐标在运动方向上的投影，$\mathrm{d}x^0=0$ 表示旧坐标中 $\mathrm{d}x_\parallel$ 两端是同时的.

(c) $\mathrm{d}x'_\perp=\mathrm{d}x_\perp$，$x_\perp$ 是空间坐标在垂直运动方向上的投影，综合以上三点可知，在洛仑兹坐标变换下积分的测度不变，即

$$\mathrm{d}^4 x'=\mathrm{d}x'^0\mathrm{d}x'_\parallel\mathrm{d}'_\perp=\mathrm{d}x^0\mathrm{d}x_\parallel x_\perp=\mathrm{d}^4 x \tag{6.4.5}$$

另一方面，一个系统的作用量是一个固有的物理量，它应当是在洛仑兹坐标变换下不变的标量，因此也就要求拉格朗日量密度也是洛仑兹标量. 根据这一要求，由电磁场的 $F^{\mu\nu}$，A^{μ}，j^{μ} 这些物理量来构成一个标量的 L，其最可能的形式可以表示如下

$$L=-\frac{1}{4}F_{\mu\sigma}F^{\mu\sigma}-j^{\gamma}A_{\gamma} \tag{6.4.6}$$

它的正确性将由以下两点来证明：一是可以明显看出它确实是标量，二是将它代入运动方程可以导出正确的麦克斯韦方程. 证明如下：

由(6.4.6)式可得

$$\frac{\partial L}{\partial A_{\nu}}=-j^{\nu}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial(\partial_{\mu}A_{\nu})}&=\frac{\partial}{\partial(\partial_{\mu}A_{\nu})}\Big[-\frac{1}{4}(\partial_{\alpha}A_{\beta}-\partial_{\beta}A_{\alpha})^{2}-j^{\nu}A_{\nu}\Big]\\&=-\frac{1}{4}[(\partial_{\mu}A_{\nu}-\partial_{\nu}A_{\mu})-(\partial_{\nu}A_{\mu}-\partial_{\mu}A_{\nu})+(\partial_{\mu}A_{\nu}-\partial_{\nu}A_{\mu})\\&\quad-(\partial_{\nu}A_{\mu}-\partial_{\nu}A_{\mu})]=-(\partial_{\mu}A_{\nu}-\partial_{\nu}A_{\mu})=-F^{\mu\nu}\end{aligned}$$

将上两式代入运动方程(6.4.4)式即得麦克斯韦方程

$$\partial_{\mu}F^{\mu\nu}=j^{\nu} \tag{6.4.7}$$

6.4.3 电磁场的哈密顿量密度

获得了正确的拉格朗日量密度后便可导出电磁场的哈密顿量密度. 根据哈密顿量密度与拉格朗日量密度的关系，有

$$\begin{aligned}h&=\frac{\partial A_{\mu}}{\partial t}\frac{\partial L}{\partial\left(\frac{\partial A_{\mu}}{\partial t}\right)}-L=-(F_{0\mu}+\partial_{\mu}A_{0})F^{0\mu}+\frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu}+j_{\mu}A^{\mu}\\&=\boldsymbol{E}\cdot\nabla\Phi+\frac{1}{2}(\boldsymbol{E}^{2}+\boldsymbol{B}^{2})+j_{\mu}A^{\mu}\end{aligned} \tag{6.4.8}$$

在导出上式时用到了以下一些性质：

(a) $F_{0\mu}=\dfrac{\partial A_{\mu}}{\partial t}-\dfrac{\partial A_{0}}{\partial x^{\mu}}$　　故有 $\dfrac{\partial A_{\mu}}{\partial t}=(F_{0\mu}+\partial_{\mu}A_{0})$

(b) $$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial\left(\frac{\partial A_{\mu}}{\partial t}\right)}&=\frac{\partial}{\partial\left(\frac{\partial A_{\mu}}{\partial t}\right)}\left(-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\right)\\&=\frac{\partial F_{0\mu}}{\partial\left(\frac{\partial A_{\mu}}{\partial t}\right)}\frac{\partial}{\partial F_{0\mu}}\left(-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\right)=-F^{0\mu}\end{aligned}$$

(c) $-(F_{0\mu}+\partial_\mu A_0)F^{0\mu}=-\sum_i(F_{0i}+\partial_i A_0)F^{0i}$

$$=-\sum_i(E_i+\partial_i\Phi)(-E_i)=\boldsymbol{E}^2+\boldsymbol{E}\cdot\nabla\Phi$$

(d) $\frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{B}^2-\boldsymbol{E}^2)$

在作进一步讨论时还需要选定规范. 如果关心的是粒子的速度远小于光速的情形，则选取库仑规范条件更为方便. 库仑规范的条件是

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0 \tag{6.4.9}$$

如果现有的 $\boldsymbol{A}$ 不满足库仑规范条件，则可选择 $\chi(x)$

$$\chi(x)=-\int d^3x'\frac{1}{4\pi}\frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\nabla'\cdot A(\boldsymbol{x}',t) \tag{6.4.10}$$

作规范变换

$$\boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}-\nabla\chi \tag{6.4.11}$$

则可得

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}'=\nabla\cdot\boldsymbol{A}+\int d^3x'\,\nabla^2\frac{1}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\nabla'\cdot A(\boldsymbol{x}',t)$$

$$=\nabla\cdot\boldsymbol{A}-\int d^3x'\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\nabla'\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}',t)=0 \tag{6.4.12}$$

即通过以上的变换可以使变换后的 A'^μ 满足(6.4.9)式的条件. 假定已选定 A^μ 满足库仑规范条件，这时来看麦克斯韦方程 $\Box A^\nu-\partial^\nu(\partial_\mu A^\mu)=j^\nu$. 当取 $\nu=0$ 时，上述方程成为

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\nabla^2\right)A^0-\partial^0(\partial_0A^0-\nabla\cdot\boldsymbol{A})=\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\nabla^2\right)A^0-\partial_t^2A^0$$

$$=-\nabla^2A^0=j^0=\rho$$

即

$$\nabla^2\Phi=-\rho \tag{6.4.13}$$

或

$$\Phi^0(\boldsymbol{x},t)=\int d^3x'\frac{1}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\rho(\boldsymbol{x}',t) \tag{6.4.14}$$

从得到的(6.4.14)式可以得出一个重要的结论，即在库仑规范条件下，电磁场的标量势完全决定于电荷密度而与流密度无关.

6.4.4 库仑规范下的哈密顿量

将(6.4.8)式的哈密顿量密度改写一下

$$h=\frac{1}{2}(\boldsymbol{E}^2+\boldsymbol{B}^2)+\boldsymbol{E}\cdot\nabla\Phi+j_\mu A^\mu$$

$$=\frac{1}{2}(\boldsymbol{E}^2+\boldsymbol{B}^2)+\nabla\cdot(\Phi\boldsymbol{E})-\Phi\nabla\cdot\boldsymbol{E}+j_\mu A^\mu \tag{6.4.15}$$

然后分别对上式的各项予以讨论.

(a) 因为总要将 h 代入积分去求系统的哈密顿量 H，第二项 $\nabla\cdot(\Phi\boldsymbol{E})$ 对空间积分后成为无穷远处的表面项，因而为 0，不起作用，故可舍去.

(b) 在库仑规范里有

$$\nabla\cdot\boldsymbol{E}=\nabla\cdot\left(-\nabla A^0-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}\right)=-\nabla^2A^0-\frac{\partial}{\partial t}(\nabla\cdot\boldsymbol{A})=-\nabla^2A^0=\rho$$

因此(6.4.15)式中的第三项与第四项可以写成

$$\begin{aligned}-\Phi\nabla\cdot\boldsymbol{E}+j_\mu A^\mu&=-\Phi\nabla\cdot\boldsymbol{E}+j_0A^0+\sum_i j_iA^i\\&=-\Phi\rho+\rho\Phi-\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{A}=-\boldsymbol{j}\cdot A\end{aligned}\tag{6.4.16}$$

综合(a)，(b)的讨论，h 可表示成

$$h=\frac{1}{2}(\boldsymbol{E}^2+\boldsymbol{B}^2)-\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{A}\tag{6.4.17}$$

为了从哈密顿量密度积分得出系统的哈密顿量，先作一点准备. 对于任何一个矢量场 $\boldsymbol{F}$ 总可以将它分解成纵、横两部分，即

$$\boldsymbol{F}=\boldsymbol{F}_\parallel+\boldsymbol{F}_\perp\tag{6.4.18}$$

其中

$$\nabla\cdot\boldsymbol{F}_\perp=0,\quad \nabla\times\boldsymbol{F}_\parallel=0\tag{6.4.19}$$

这一点可以简单证明如下. 对任意矢量场 $\boldsymbol{F}$ 作傅里叶变换

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})=\int\boldsymbol{f}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\mathrm{d}\boldsymbol{k}\tag{6.4.20}$$

然后将 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{k})$ 分解为沿 $\hat{k}$ 方向的 $f_\parallel\hat{k}$ 和垂直于 $\hat{k}$ 方向的 $f_\perp\hat{k}_\perp$.

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{k})=f_\parallel\hat{k}+f_\perp\hat{k}_\perp\tag{6.4.21}$$

其中 $\hat{k}$ 和 $\hat{k}_\perp$ 分别是沿 $\hat{k}$ 方向和垂直于 $\hat{k}$ 方向的两个单位矢量，并有

$$\begin{aligned}f_\parallel&=\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{k}\\f_\perp&=\boldsymbol{f}\cdot\hat{k}_\perp\end{aligned}\tag{6.4.22}$$

然后定义

$$\begin{aligned}\boldsymbol{F}_\parallel&\equiv\int f_\parallel\hat{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\mathrm{d}\boldsymbol{k}\\\boldsymbol{F}_\perp&\equiv\int f_\perp\hat{k}_\perp\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\mathrm{d}\boldsymbol{k}\end{aligned}\tag{6.4.23}$$

便可证它们满足(6.4.19)式的条件. 把上面对一般矢量场可分解为纵、横两部分的结论应用到电场强度 $\boldsymbol{E}$ 上

$$\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}_\parallel+\boldsymbol{E}_\perp\tag{6.4.24}$$

横场

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E}_{\perp} = 0$$

纵场

$$\nabla \times \boldsymbol{E}_{\parallel} = 0 \tag{6.4.25}$$

另一方面

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \tag{6.4.26}$$

在选择库仑规范的条件下将(6.4.24)式与(6.4.26)式作比较可知

$$\begin{aligned} \boldsymbol{E}_{\parallel} &= -\nabla\varphi \\ \boldsymbol{E}_{\perp} &= -\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \end{aligned} \tag{6.4.27}$$

这是因为

$$\nabla \times (-\nabla\varphi) = 0$$

及

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}\right) = -\frac{\partial}{\partial t}(\nabla \cdot \boldsymbol{A}) = 0 \tag{6.4.28}$$

同时因为$\nabla \cdot \boldsymbol{A}=0$,便知 $\boldsymbol{A}$ 是横场,即

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_{\perp} \tag{6.4.29}$$

因此 $\boldsymbol{E}^2$ 对空间的积分为

$$\begin{aligned} \int \boldsymbol{E}^2 \mathrm{d}^3 x &= \int (\boldsymbol{E}_{\parallel} + \boldsymbol{E}_{\perp})^2 \mathrm{d}^3 x = \int \left(-\nabla \Phi - \frac{\partial \boldsymbol{A}_{\perp}}{\partial t}\right)^2 \mathrm{d}^3 x \\ &= \int \left[(-\nabla \Phi)^2 + \left(-\frac{\partial \boldsymbol{A}_{\perp}}{\partial t}\right)^2 + 2(\nabla \Phi)\left(\frac{\partial \boldsymbol{A}_{\perp}}{\partial t}\right)\right] \mathrm{d}^3 x \\ &= \int \left[(\nabla \Phi)^2 + \left(\frac{\partial \boldsymbol{A}_{\perp}}{\partial t}\right)^2 - 2\Phi \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \cdot \boldsymbol{A}_{\perp})\right] \mathrm{d}^3 x + 2\left[\Phi \frac{\partial \boldsymbol{A}_{\perp}}{\partial t}\right]_{\infty\text{表面}} \\ &= \int \left[(\nabla \Phi)^2 + \left(\frac{\partial \boldsymbol{A}_{\perp}}{\partial t}\right)^2\right] \mathrm{d}^3 x \end{aligned} \tag{6.4.30}$$

上式第三项在库仑规范下为零,第四项是在无穷远处的面上取值自然为零. 利用(6.4.30)式及(6.4.15)式,得到系统的哈密顿量为

$$\begin{aligned} H &= \int h \mathrm{d}^3 x \\ &= \int \mathrm{d}^3 x \left[\frac{1}{2}(\boldsymbol{B} + \boldsymbol{E}^2) - \boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{A}\right] \\ &= \int \mathrm{d}^3 x \left[\frac{1}{2}(\nabla \times \boldsymbol{A}_{\perp})^2 + (\nabla \varphi)^2 + \left(\frac{\partial \boldsymbol{A}_{\perp}}{\partial t}\right)^2 - \boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{A}_{\perp}\right] \end{aligned} \tag{6.4.31}$$

对上式中的第二项作分部积分

$$\int (\nabla\varphi)^2 \mathrm{d}^3x = \nabla(\varphi\nabla\varphi)_{\infty面} - \int \varphi\nabla^2\varphi \mathrm{d}^3x$$
$$= \int \varphi(\boldsymbol{x})\rho(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x = \int \frac{\rho(\boldsymbol{x})\rho(\boldsymbol{x}')\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \tag{6.4.32}$$

上式的最后一个等式用到(6.4.14)式，这样(6.4.31)式最终可表示为

$$H = \int \mathrm{d}^3x\left[\frac{1}{2}(\nabla\times\boldsymbol{A}_\perp)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\boldsymbol{A}_\perp}{\partial t}\right)^2 - \boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{A}_\perp\right]$$
$$+ \frac{1}{2}\int \frac{\rho(\boldsymbol{x})\rho(\boldsymbol{x}')\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \tag{6.4.33}$$

至此可以得出如下一些结论：

(a) 取库仑规范时，矢量场为横场；

(b) 系统的哈密顿量分成场能以及场与物质的荷与流之间的相互作用两部分；

(c) 场与荷、流之间的作用又明确分为矢量场与流的作用以及标量场与荷的作用，后者还可看做是荷与荷的作用.

6.5 磁 单 极

6.5.1 麦克斯韦理论的电磁不对称

麦克斯韦理论虽然成功地描述了电磁的规律，而且也符合相对论的协变性要求，但它存在着明显的电与磁的不对称性，即在麦克斯韦方程组里出现有电荷及电流密度而没有磁荷及磁流密度. 为了清楚起见，这里将麦克斯韦方程组重写如下

$$\begin{cases} \nabla\cdot\boldsymbol{E} = \rho \quad \nabla\times\boldsymbol{B} - \dfrac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t} = \boldsymbol{j} \\ \nabla\cdot\boldsymbol{B} = 0 \quad \nabla\times\boldsymbol{E} + \dfrac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} = 0 \end{cases} \tag{6.5.1}$$

或写成协变的形式为

$$\begin{cases} \partial_\mu F^{\mu\nu} = j^\nu \\ \partial_\mu F^{*\mu\nu} = 0 \end{cases} \quad (F^{*\mu\nu} \equiv \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta}F_{\alpha\beta}) \tag{6.5.2}$$

设想一下要是真的有电与磁的完全对称性的话，那么电磁对称的方程组则似应写成如下的形式

$$\begin{cases} \nabla\cdot\boldsymbol{E} = \rho \quad \nabla\times\boldsymbol{B} - \dfrac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t} = \boldsymbol{j} \\ \nabla\cdot\boldsymbol{B} = \rho_\mu \quad \nabla\times\boldsymbol{E} + \dfrac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} = \boldsymbol{j}_\mu \end{cases} \tag{6.5.3}$$

或

$$\begin{cases}\partial_\mu F^{\mu\nu} = j^\nu \\ \partial_\mu F^{*\mu\nu} = j^\nu_\mu\end{cases} \tag{6.5.4}$$

其中 ρ_μ 是磁荷，j_μ 是磁流密度. Dirac 最先提出电磁对称理论的设想，并且他从这样的理论出发还得到一个十分有趣的结论. 下面就来讨论他的论证.

6.5.2　Dirac 磁单极假想

(a) 如果有磁荷存在并有

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = \rho_M \tag{6.5.5}$$

则和相应的$\nabla \cdot \boldsymbol{E}=\rho$ 完全一样，可知一个磁荷 ρ_M 产生的磁场分布一定为

$$\boldsymbol{B} = \frac{g_M}{r^3}\boldsymbol{r} \tag{6.5.6}$$

相应的矢量势可以在球坐标中表示成

$$\boldsymbol{A}^{(1)} = g_M\hat{\varphi}\,\frac{1-\cos\theta}{r\sin\theta} \tag{6.5.7a}$$

或

$$\boldsymbol{A}^{(2)} = -g_M\hat{\varphi}\,\frac{1+\cos\theta}{r\sin\theta} \tag{6.5.7b}$$

其中 $\hat{\varphi}$ 是球坐标的 φ 方向上的单位矢量. (6.5.7a)式或(6.5.7b)式的正确性可以由将它们代入下式

$$\nabla\times\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B} \tag{6.5.8}$$

看算出的 $\boldsymbol{B}$ 是否是和(6.5.6)式一致来检验. 根据正交曲面坐标系中矢量场的旋量公式，对于矢量场 $\boldsymbol{u}=(u_1,u_2,u_3)$有

$$(\nabla\times\boldsymbol{u})_{ij} = \frac{1}{H_iH_j}\left\{\frac{\partial(H_ju_j)}{\partial\xi_i} - \frac{\partial(H_iu_i)}{\partial\xi_j}\right\} \tag{6.5.9}$$

对于球坐标有如下的关系

$$\xi_1 = r,\quad \xi_2=\theta,\quad \xi_3=\varphi \tag{6.5.10}$$
$$H_1 = H_r = 1,\quad H_2 = H_\theta = r,\quad H_3 = H_\varphi = r\sin\theta$$

以 $\boldsymbol{A}^{(1)}$ 为例，有

$$A_r^{(1)} = A_\theta^{(1)} = 0,\quad A_\Phi^{(1)} = g_M\,\frac{1-\cos\theta}{r\sin\theta} \tag{6.5.11}$$

将(6.5.10)式及(6.5.11)式代入(6.5.9)式，得

$$\begin{aligned}B_r = (\nabla\times\boldsymbol{A})_\varphi &= \frac{1}{H_\theta H_\varphi}\left\{\frac{\partial(H_\Phi A_\Phi)}{\partial\theta} - \frac{\partial(H_\theta A_\theta)}{\partial\varphi}\right\}\\ &= \frac{1}{r\cdot r\sin\theta}\left\{\frac{\partial}{\partial\theta}(r\sin\theta\cdot\frac{g_M(1-\cos\theta)}{r\sin\theta}\right\}\\ &= \frac{g_M}{r^2\sin\theta}\left\{\frac{\partial}{\partial\theta}(1-\cos\theta)\right\} = \frac{g_M}{r^2}\end{aligned} \tag{6.5.12}$$

$$B_\theta = (\nabla \times \mathbf{A})_{\varphi r} = \frac{1}{H_\varphi H_r}\left\{\frac{\partial(H_r A_r)}{\partial \varphi} - \frac{\partial(H_\varphi A_\varphi)}{\partial r}\right\}$$

$$= \frac{g_M}{r\sin\theta}\left\{-\frac{\partial}{\partial r}(1-\cos\theta)\right\} = 0 \tag{6.5.13}$$

$$B_\varphi = (\nabla \times \mathbf{A})_{r\theta} = \frac{1}{H_\varphi H_r}\left\{\frac{\partial(H_r A_r)}{\partial \varphi} - \frac{\partial(H_\varphi A_\varphi)}{\partial r}\right\} = \frac{g_M}{r}\{0\} = 0 \tag{6.5.14}$$

得到的 $\boldsymbol{B}$ 的确与(6.5.6)式给出的一致.对于矢量势 $\mathbf{A}^{(2)}$ 的表示可类似地验证.

(b) 不过,这样的理论,仔细一点考察会发现它存在着矛盾.为说明其矛盾的存在,我们计算 $\boldsymbol{B}$ 在一个闭合面上的通量

$$\int_S \boldsymbol{B} \times \mathrm{d}\boldsymbol{S} = \int_v \nabla \cdot \boldsymbol{B}\mathrm{d}^3 x \tag{6.5.15}$$

(i) 如果根据(6.5.5)式计算,则有

$$\int_S \boldsymbol{B} \times \mathrm{d}\boldsymbol{S} = \int_v \nabla \cdot \boldsymbol{B}\mathrm{d}^3 x = \int_v \rho_M \mathrm{d}^3 x = g_M \tag{6.5.16}$$

(ii) 如果用 $\boldsymbol{B}=\nabla \times \mathbf{A}$ 来计算,则有

$$\int_S \boldsymbol{B} \times \mathrm{d}\boldsymbol{S} = \int \nabla \cdot \boldsymbol{B}\mathrm{d}^3 x = \int \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A})\mathrm{d}^3 x = 0 \tag{6.5.17}$$

因为 $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A})=0$.

这样一来显然表观上产生了矛盾.这种表观上的矛盾的实质是(i)的计算没错,但(ii)的做法是有问题的,根源在于不论 $\mathbf{A}^{(1)}$ 还是 $\mathbf{A}^{(2)}$ 都不是在全空间上的解析表示,所以(6.5.17)式的算法不成立.这是因为由(6.5.7a)式可知 $\mathbf{A}^{(1)}$ 在 $\theta=\pi$ 时有奇异性,而 $\mathbf{A}^{(2)}$ 在 $\theta=0$ 时也有奇异性,所以"磁"矢量势不能由单一的 $\mathbf{A}^{(1)}$ 或单一的 $\mathbf{A}^2$ 来描述(见图 6.3).经过这样的分析以后可以看出,由(i)及(ii)两种计算得到的矛盾不是真实的,原因是(ii)的计算是不成立的.

(c) 以上的分析指明除上、下两极的邻域分别只能由 $\mathbf{A}^{(1)}$ 或 $\mathbf{A}^{(2)}$ 描述外,其余的空间点 $\mathbf{A}^{(1)}$ 和 $\mathbf{A}^{(2)}$ 都可描述,并给出相同的 $\boldsymbol{B}$ 来,可见 $\mathbf{A}^{(1)}$ 和 $\mathbf{A}^{(2)}$ 之间应当只差一个规范变换.根据规范变换的公式及 $\mathbf{A}^{(1)}$,$\mathbf{A}^{(2)}$ 的(6.5.7a)式及(6.5.7b)式的表达,有

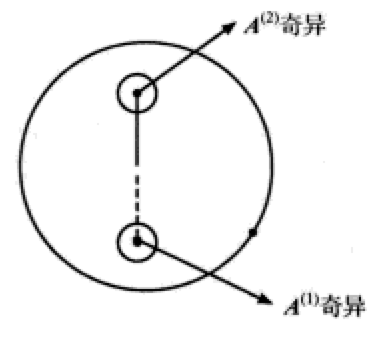


图 6.3

$$\mathbf{A}^{(1)} - \mathbf{A}^{(2)} = \hat{\varphi}\frac{2g_M}{r\sin\theta} = -\nabla\chi \tag{6.5.18}$$

得

$$\chi = -2g_M\varphi \tag{6.5.19}$$

由(6.5.18)式导出(6.5.19)式是根据球坐标中的梯度公式

$$(\nabla\chi)_i = \frac{1}{H_i}\frac{\partial\chi}{\partial\xi_i} \tag{6.5.20}$$

推导如下：球坐标的 ξ_i，H_i 已由(6.5.10)式给出，将(6.5.19)式给出的χ代入(6.5.20)式得

$$\begin{aligned}
(\nabla\chi)_r &= \frac{\partial}{\partial r}(-2g_M\varphi) = 0 \\
(\nabla\chi)_\theta &= \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}(-2g_M\varphi) = 0 \\
(\nabla\chi)_\varphi &= \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}(-2g_M\varphi) = -\frac{2g_M}{r\sin\theta}
\end{aligned} \tag{6.5.21}$$

这就证明了从(6.5.18)式到(6.5.19)式的正确性，即 $\mathbf{A}^{(1)}$ 与 $\mathbf{A}^{(2)}$ 只差一个规范变换. 根据前面的讨论，当电磁场的势作规范变换时，粒子的波函数同时也应作相应的变换

$$\psi^{(2)} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\chi}\psi^{(1)} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}2eg_M\varphi}\psi^{(1)} \tag{6.5.22}$$

另一方面波函数的唯一性又要求

$$\psi^{(1)}(\varphi+2\pi) = \psi^{(1)}(\varphi) \tag{6.5.23}$$

以及

$$\psi^{(2)}(\varphi+2\pi) = \psi^{(2)}(\varphi) \tag{6.5.24}$$

于是结合(6.5.22)、(6.5.23)及(6.5.24)式可导出如下的等式

$$\exp\left[2\mathrm{i}eg_M\varphi + 2\mathrm{i}eg_M\cdot 2\pi\right] = \exp\left(2\mathrm{i}eg_M\varphi\right) \tag{6.5.25}$$

上式成立的条件是

$$2eg_M = n \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{6.5.26}$$

正如本节一开始提到的，从以上的讨论可导出一个有趣的结论：如果 Dirac 的电磁对称理论的设想成立，自然界中真的存在磁荷(磁单极)，则从上式看出应当有关系 $e=\frac{n}{2g_M}$. 这个关系式自然地解释了为什么物理体系所带的电荷是量子化的而非取连续值，即电荷存在单元 $e=\frac{1}{2g_M}$.

6.6　电磁场的量子化

前面论述了一些为下面的讨论作基础的电磁场相关内容. 需要特别指出的是，在本书的范围内粒子体系的量子化是在非相对论框架下进行的，但电磁场的量子化必须在相对论框架下进行，原因是光子以光速传播. 这就是在前面的预备知识讨论中总是离不开相对论的原因.

6.6.1　准备工作

(a) 为清楚起见，先讨论有限空间的情形，取 $V=1$，以后再扩展到 $V\to\infty$；

(b) 由于在这时关心的是粒子速度远小于光速 c 的物理问题，所以如前所述以选择库仑规范为宜；

(c) 在库仑规范下标量势由 ρ 唯一地确定. 考虑自由场 $S,\boldsymbol{j}=0$ 的情形时，便有 $\varphi=0$，即只需考虑矢量势 $\boldsymbol{A}$. 将矢量势 $\boldsymbol{A}$ 作傅里叶展开

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)=\sum_{k}[\boldsymbol{A}_{k}(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}+\boldsymbol{A}_{k}^{*}(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}] \tag{6.6.1}$$

其中分立的波数 $\boldsymbol{k}$ 的取值由边界条件确定，例如可取周期性边界条件. 已知在库仑规范下 $\boldsymbol{A}$ 由如下的方程决定

$$\Box\boldsymbol{A}=\left(\frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}}-\nabla^{2}\right)\boldsymbol{A}=0 \tag{6.6.2}$$

将(6.6.1)式代入(6.6.2)式并利用规范条件，可得 $\boldsymbol{A}_{k}(t)$ 满足以下的两个条件

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{A}_{k}(t)=0 \tag{6.6.3}$$

$$\left(\frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}}+\boldsymbol{k}^{2}\right)\boldsymbol{A}_{k}(t)=0 \tag{6.6.4}$$

其解是

$$\boldsymbol{A}_{k}(t)=\sum_{\lambda=1}^{2}c_{k\lambda}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{k\lambda}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{k}t}\equiv\sum_{\lambda=1}^{2}\boldsymbol{A}_{k\lambda}(t) \tag{6.6.5}$$

其中

$$\omega_{k}=|\boldsymbol{k}|\quad\text{及}\quad\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{k}=0 \tag{6.6.6}$$

为了准备过渡到量子化以及以后计算的方便，将 $\boldsymbol{A}_{k\lambda}$ 重新写成

$$\boldsymbol{A}_{k\lambda}(t)=\frac{1}{\sqrt{2\omega_{k}}}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{k\lambda}a_{k\lambda}(t) \tag{6.6.7}$$

由于现在 $\varphi=0$，所以由(6.6.1)及(6.6.5)式得

$$\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}=\sum_{k\lambda}(\mathrm{i}\omega_{k}\boldsymbol{A}_{k\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}-\mathrm{i}\omega_{k}\boldsymbol{A}_{k\lambda}^{*}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}) \tag{6.6.8}$$

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=\sum_{k\lambda}(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}_{k\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}_{k\lambda}^{*}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}) \tag{6.6.9}$$

将(6.6.8)与(6.6.9)式代入电磁场的哈密顿量表示式中

$$\begin{aligned}H_{\mathrm{rad}}&=\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^{3}x(\boldsymbol{E}^{2}+\boldsymbol{B}^{2})\\&=\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^{3}x\sum_{k\lambda}\sum_{k'\lambda'}[(\mathrm{i}\omega_{k}\boldsymbol{A}_{k\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}-\mathrm{i}\omega_{k}\boldsymbol{A}_{k\lambda}^{*}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}})\\&\quad\cdot(\mathrm{i}\omega_{k'}\boldsymbol{A}_{k'\lambda'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}}-\mathrm{i}\omega_{k}'\boldsymbol{A}_{k'\lambda'}^{*}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}})\\&\quad+(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}_{k\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}_{k\lambda}^{*}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}})\end{aligned}$$

$$\cdot(\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\times\boldsymbol{A}_{k'\lambda'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}}-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\times\boldsymbol{A}^*_{k\lambda'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}})] \tag{6.6.10}$$

利用以下的关系

$$\int_V \mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\pm\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{x}}=\delta_{\boldsymbol{k},\mp\boldsymbol{k}'} \tag{6.6.11}$$

(6.6.10)式可写成

$$\begin{aligned}H_{\mathrm{rad}}&=\frac{1}{2}\sum_{k\lambda\lambda'}[-\omega_k^2\boldsymbol{A}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{A}_{-k\lambda'}-\omega_k^2\boldsymbol{A}^*_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{A}^*_{-k\lambda'}+2\omega_k^2\boldsymbol{A}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{A}^*_{k\lambda'}+(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}_{k\lambda})\\&\quad\cdot(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}_{-k\lambda'})+(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}^*_{k\lambda})\cdot(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}^*_{-k\lambda'})+2(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}_{k\lambda})\cdot(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}^*_{k\lambda'})]\\&=\sum_{k\lambda\lambda'}2\omega_k^2\boldsymbol{A}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{A}^*_{k\lambda'}=\sum_{k'\lambda\lambda'}2\omega_k^2\frac{1}{\sqrt{2\omega_k\cdot2\omega_k}}\hat{\varepsilon}_{k\lambda}\cdot\hat{\varepsilon}_{k\lambda'}a^*_{k\lambda'}a_{k\lambda}\\&=\sum_{k\lambda\lambda'}\omega_k\delta_{\lambda\lambda'}a^*_{k\lambda'}a_{k\lambda}=\sum_{k\lambda}\omega_k a^*_{k\lambda}a_{k\lambda}\end{aligned} \tag{6.6.12}$$

其中利用(6.6.7)式及以下的等式

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}_{k\lambda})\cdot(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}_{-k\lambda'})&=(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}_{k\lambda}\times\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{A}_{-k\lambda'}\\&=[k^2\boldsymbol{A}_{k\lambda}-(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{A}_{k\lambda})\boldsymbol{k}]\cdot\boldsymbol{A}_{-k\lambda'}=k^2\boldsymbol{A}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{A}_{-k'\lambda'}\end{aligned}$$

以及类似

$$2(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}_{k\lambda})\cdot(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}^*_{k\lambda'})=2\omega_k^2\boldsymbol{A}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{A}^*_{k\lambda'}$$

使得 $\boldsymbol{A}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{A}_{-k\lambda'}$ 和 $\boldsymbol{A}^*_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{A}^*_{-k\lambda'}$ 这两种项相互消掉只剩下(6.6.12)式的第一等式后的 $2\omega_k^2\boldsymbol{A}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{A}^*_{k\lambda'}$

6.6.2 电磁场的量子化

有了以上的准备后，现在可以讨论电磁场的量子化. 量子化的过程是将相应的哈密顿量转化成哈密顿量算符，即把(6.6.12)式中的 $H_r\to\hat{H}_r$，因而其右方的 $a_{k\lambda}$ 及 $a^*_{k\lambda}$ 相应地转化为算符

$$a_{k\lambda}\to\hat{a}_{k\lambda},\quad a^*_{k\lambda}\to\hat{a}^+_{k\lambda} \tag{6.6.13}$$

这是一对共轭的算符，它们应有以下的对易关系

$$\begin{aligned}&[\hat{a}_{k\lambda},\hat{a}^+_{k'\lambda'}]=\delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'}\\&[\hat{a}^+_{k\lambda},\hat{a}^+_{k'\lambda'}]=0\quad[\hat{a}^+_{k\lambda}\cdot\hat{a}^+_{k'\lambda'}]=0\end{aligned} \tag{6.6.14}$$

不过在把(6.6.12)式转化为算符时，算符的次序是不能随意改变的. 但是作为经典量时 $a^*_{k\lambda}a_{k\lambda}$ 与 $a_{k\lambda}a^*_{k\lambda}$ 是没有区别的，要把它们转化为算符就会出现是取 $\hat{a}^+_{k\lambda}\hat{a}_{k\lambda}$ 还是取 $\hat{a}_{k\lambda}\hat{a}^+_{k\lambda}$ 的问题. 根据量子化的对等原则应取作如下的形式

$$\begin{aligned}\hat{H}_r&=\sum_{k\lambda}\frac{\omega_k}{2}(\hat{a}_{k\lambda}\hat{a}^+_{k\lambda}+\hat{a}^+_{k\lambda}a_{k\lambda})\\&=\sum_{k\lambda}\omega_k\left(\hat{N}_{k\lambda}+\frac{1}{2}\right)\end{aligned} \tag{6.6.15}$$

其中

$$\hat{N}_{k'\lambda} = \hat{a}^{+}_{k\lambda}\hat{a}_{k\lambda} \tag{6.6.16}$$

对于每一模式($\boldsymbol{k}\lambda$),它的粒子数的本征态$|n_{k\lambda}\rangle$是

$$|n_{k\lambda}\rangle = \frac{(\hat{a}^{+}_{k\lambda})^{n}}{\sqrt{n!}}|0_{k\lambda}\rangle \tag{6.6.17}$$

并有

$$\begin{aligned} \hat{a}_{k\lambda}|n_{k'\lambda'}\rangle &= \sqrt{n_{k\lambda}}\delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'}|(n-1)_{k\lambda}\rangle \\ \hat{a}^{+}_{k\lambda}|n_{k'\lambda'}\rangle &= \sqrt{(n+1)_{k,\lambda}}\delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'}|(n+1)_{k\lambda}\rangle \end{aligned} \tag{6.6.18}$$

6.7 真空能量

6.7.1 真空能量的讨论

在前面的量子化过程中已把电磁场的矢量势表示成了算符形式

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}\sum_{\lambda}(\hat{\varepsilon}_{k,\lambda}\hat{a}_{k,\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cdot x} + \hat{\varepsilon}^{*}_{k\lambda}\hat{a}^{+}_{k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot x}) \tag{6.7.1}$$

并将电磁场系统的哈密顿量表示成了

$$\hat{H}_{\mathrm{rad}} = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda}\omega_k\left(\hat{a}^{+}_{k\lambda}\hat{a}_{k,\lambda} + \frac{1}{2}\right) \tag{6.7.2}$$

如果用$|0\rangle$标记没有电磁激发的真空态,即

$$a^{+}_{k\lambda}\hat{a}_{k\lambda}|0\rangle = 0 \tag{6.7.3}$$

则有

$$\hat{H}_{\mathrm{rad}}|0\rangle = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(3\pi)^3}\sum_{\lambda}\frac{1}{2}\omega_k|0\rangle = \infty\cdot|0\rangle \tag{6.7.4}$$

从上式看出真空态的能量是发散的,似乎给理论造成了疑难,这是在经典物理中没有遇到过的问题. 不过这种困难可以通过能量的零点移动来解决,因为如果把真空能取为零,则(6.7.2)式可写为

$$\hat{H}^{(r)}_{\mathrm{rad}} = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} = \sum_{\lambda}\omega_k\hat{a}^{+}_{k\lambda}a_{k\cdot\lambda} \tag{6.7.5}$$

所以这并非实质的困难. 但这样做是否意味着真空能真的没有任何物理意义呢?事实上并不如此. 近来人们重新考虑了这个问题并从理论上探讨了有限空间中的零点能效应,实验上也验证了这种效应的存在. 这就是所谓的 Casimir 效应.

6.7.2　Casimir 效应

为了阐明在有限空间中显现出来的真空能效应，考虑电容器两平行平板间光子系的零点能（见图 6.4）

$$E(a) = \sum_{k,\lambda} \frac{1}{2}\omega_{k\lambda} \tag{6.7.6}$$

我们先定性地讨论这个问题. 当板间距在 a 增加时，板间的光子模式数增加，反之模式数减少，即板间距缩小时板间的零点能会降低，相当于板与板之间有吸引力

$$F = -\frac{\partial E(a)}{\partial a} \tag{6.7.7}$$

图 6.4

在作用. M. Spaarnay 从实验上证实了这点.

在作了定性的描述后，下面再仔细地计算这一问题. 设 A 是板的面积，只要 A 足够大，a 足够小，近似地可认为板是无限的，所以平行于板的 x，y 方向的波数可视为不受限制，即 k_x，k_y 在 $(-\infty,\infty)$ 间连续变化，而在 Z 方向上，由于有 $\psi(0)=\psi(a)=0$ 的边界条件的要求，所以波函数应有

$$\Psi \sim \sin k_z Z \tag{6.7.8}$$

其中 k_z 取分立值

$$k_z = \frac{n\pi}{a} \quad (n = 1,2,\cdots) \tag{6.7.9}$$

因此得到不同模式的光子的能量为

$$\omega_k^{(n)} = \sqrt{{k_x}^2 + {k_y}^2 + \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2} \tag{6.7.10}$$

并可计算出板间的零点能为

$$E(a) = 2\sum_{n=1}^{\infty} A \int \frac{\mathrm{d}^2 k}{(2\pi)^2} \frac{1}{2}\omega_k^{(n)} \tag{6.7.11}$$

上式中的因子 2 来自对两个极化方向的求和，如定义

$$k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \tag{6.7.12}$$

对确定的 n，有

$$\omega_k^{(n)2} = k_x^2 + k_y^2 + \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 = k^2 + \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$$

得

$$k\mathrm{d}k = \omega_k^{(n)} \mathrm{d}\omega_k^{(n)} \tag{6.7.13}$$

于是可将(6.7.11)式改写为

$$E(a)=\sum_{n=1}^{\infty}A\int\frac{k\mathrm{d}k\mathrm{d}\varphi}{(2\pi)^2}\omega_x^{(n)}=\sum_{n=1}^{\infty}A\int\frac{k\mathrm{d}k(2\pi)}{(2\pi)^2}\omega_k^{(n)}$$

$$=A\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{2\pi}\int_{\frac{n\pi}{a}}^{\infty}\omega_k^{(n)}\cdot(\omega_k^{(n)}\mathrm{d}\omega_k^{(n)}) \tag{6.7.14}$$

上式的积分下限来自当 $k_x=k_y=0$ 时，$\omega_k^{(n)}=\frac{n\pi}{a}$. 以后 $\omega_k^{(n)}$ 就简单写成 ω，因为这时不同模式的 $\omega_k^{(n)}$ 已由不同的积分下限给出了它们的区别.

(6.7.14)式中的积分是发散的，这本来是预料中的结果，其根由是因为在 x，y 方向上考虑的模式是没有限制的. 不过由于考虑物理效应是作用在板上的力，即讨论的是 $E(a)$ 对 a 的导数，后面会看到它是有限的，因此这一物理问题仍是有意义的. 为了使计算的中间过程有意义，先加上一个衰减因子 $\mathrm{e}^{-\varepsilon\omega}$，并在计算的最后令 $\varepsilon=0$ 再回到原状，这样(6.7.14)式就可以积出了

$$E(a)=\frac{A}{2\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\int_{\frac{n\pi}{a}}^{\infty}\omega^2\mathrm{e}^{-\varepsilon\omega}\mathrm{d}\omega=\frac{A}{2\pi}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varepsilon^2}\sum_{n=1}^{\infty}\int_{\frac{n\pi}{a}}^{\infty}\mathrm{e}^{-\varepsilon\omega}\mathrm{d}\omega$$

$$=\frac{A}{2\pi}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varepsilon^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{\varepsilon}\exp\left(-\frac{n\pi\varepsilon}{a}\right)$$

$$=\frac{A}{2\pi}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varepsilon^2}\frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{1}{1-\mathrm{e}^{-\frac{\pi\varepsilon}{a}}}-1\right) \tag{6.7.15}$$

上式最后一个等式利用了等比级数的求和公式. 再利用如下的展开式来改写上式

$$\frac{1}{1-\mathrm{e}^t}=-\sum_{n=0}^{\infty}B_n\frac{t^{n-1}}{n!} \tag{6.7.16}$$

其中 B_n 是伯努利数，这样板上的单位面积上的能量可表示为

$$\frac{1}{A}E(a)=-\frac{1}{2\pi}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2\varepsilon^2}\frac{1}{\varepsilon}\left[1+\sum_{n=0}^{\infty}B_n\frac{\left(-\frac{\pi\varepsilon}{a}\right)^{n-1}}{n!}\right]$$

$$=-\frac{1}{2\pi}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varepsilon^2}\left(\frac{1}{\varepsilon}-B_0\frac{a}{\pi\varepsilon^2}+B_1\frac{1}{\varepsilon}-B_2\frac{\pi}{2a}+B_3\frac{\pi^2\varepsilon}{6a^2}-B_4\frac{\pi^3\varepsilon^2}{24a^3}+\cdots\right)$$

$$=3B_0\frac{a}{\pi^2\varepsilon^4}-(1+B_1)\frac{1}{\pi\varepsilon^3}+B_4\frac{\pi^2}{24a^3}+\cdots \tag{6.7.17}$$

引入

$$\frac{3B_0}{\pi^2\varepsilon^4}\equiv C_0,\quad -\frac{1+B_1}{\pi\varepsilon^3}\equiv C_1,\quad B_4\frac{\pi^2}{24}\equiv C_2 \tag{6.7.18}$$

可将(6.7.17)式写成

$$\frac{1}{A}E(a) = C_0 a + C_1 + \frac{C_2}{a^3} + 0(\varepsilon) \tag{6.7.19}$$

对 a 作导数得单位面积上受到的力为

$$\frac{1}{A}F = -\frac{\partial}{\partial a}\left(\frac{1}{A}E(a)\right) = \frac{3C_2}{a^4} + C_0 \tag{6.7.20}$$

注意(6.7.19)式后面的项～$0(\varepsilon)$作导数后令 $\varepsilon \to 0$ 时，它们都为零. 现在把 $B_4 = -\frac{1}{30}$ 代入 C_2 的表示，最后得

$$\frac{1}{A}F = -\frac{\pi^2}{240a^4} + C_0 \tag{6.7.21}$$

上式中的负号表示受到的是吸引力. 需要强调指出的是，这一效应不能简单地理解为真空能量的效应．从一开始我们就指出，所讨论的是两个金属板之间的空间，此空间不是真空空间，即不是不存在金属板时对应的几何空间．因此，它的物理效应应该是这一物理空间和对应的真空空间的零点能差. 其值为(6.7.21)式中取 $a \to \infty$的值(即金属板的效应不存在时)，即 C_0. 由此可得，物理上感知的单位面积上的力应当是

$$\frac{1}{A}F_{\text{eff}} = \left(\frac{1}{A}F + C_0\right) - C_0 = -\frac{\pi^2}{240a^4} \tag{6.7.22}$$

这一理论结果为实验所证实. 最后再重复讲一下，Casimir 不是真空的零点能的效应，它是物理空间中的零点能的效应.

6.8　原子物理中的应用之一

6.8.1　原子中的电子与电磁场

一个原子中通常都有多个电子围绕核运动，因此它是一个复杂的多体问题. 为了避免多体系统带来的复杂性及突出电子在不同的能级间跃迁时与电磁场或光子的作用，我们只考虑单电子原子的简单情形，并假定电子具有一个基态$|A\rangle$且只有一个激发态$|B\rangle$. 现在考虑电子初始时居于激发态而且这时没有光子，因此初态$|i\rangle$可表示为

$$|i\rangle = |B\rangle|0\rangle \tag{6.8.1}$$

即它是电子的态矢$|B\rangle$及没有光子的态$|0\rangle$的直积，下面要讨论的问题是它向电子基态及具有一个光子的末态$|f\rangle$的跃迁

$$|f\rangle = |A\rangle|1_{\boldsymbol{k},\lambda}\rangle \tag{6.8.2}$$

$|1_{\boldsymbol{k},\lambda}\rangle$表示一个光子其波矢为 $\boldsymbol{k}$，极化为 λ 的态矢. 根据散射理论，对于这种跃迁要求我们考虑从$|i\rangle$到电子处于基态及所有不同的 $\boldsymbol{k}$ 和两种 λ 的光子的末态求和. 是

什么原因使系统从$|i\rangle$跃迁到$|f\rangle$呢？答案是这种跃迁是电子与电磁场的相互作用引起的.

现在先分析一下原子中的电子及电磁场耦合系统的哈密顿量

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\frac{(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A})^2}{2m}+e\Phi+\hat{H}_{\text{rad}}\\&=\hat{H}_{\text{rad}}+\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+e\Phi-\frac{e}{2m}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})+\frac{e^2}{2m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}\end{aligned}\tag{6.8.3}$$

把$\hat{H}$分成两部分

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}\tag{6.8.4a}$$

$$\hat{H}_0=\hat{H}_{\text{rad}}+\frac{p^2}{2m}+e\Phi\tag{6.8.4b}$$

$$\hat{V}=-\frac{e}{2m}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})+\frac{e^2}{2m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}\tag{6.8.4c}$$

其中$\hat{H}_0$包括电磁场的哈密顿量$\hat{H}_{\text{rad}}$及电子在核静电场中的哈密顿量,后者使电子在原子中形成能级及相应的定态$|A\rangle$和$|B\rangle$,而$\hat{V}$是引起电子在定态之间跃迁的相互作用.在量子力学中讨论库仑场中电子的能级时,$\hat{V}$未予考虑.

选择库仑规范$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$,可得以下关系：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}\psi&=-\mathrm{i}\nabla\cdot(\boldsymbol{A}\psi)=-\mathrm{i}(\nabla\cdot\boldsymbol{A})\psi-\mathrm{i}\boldsymbol{A}\cdot\nabla\psi\\&=-\mathrm{i}\boldsymbol{A}\cdot\nabla\psi=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}\psi\end{aligned}$$

所以在库仑规范下$\hat{V}$可改写成

$$\hat{V}=-\frac{e}{m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}+\frac{e^2}{2m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}\tag{6.8.5}$$

而$|i\rangle$和$|f\rangle$都是$\hat{H}_0$的本征态.

$$\hat{H}_0\mid i\rangle=\hat{H}_0\mid B\rangle\mid 0\rangle=E_B^{(0)}\mid B\rangle\mid 0\rangle=E_B^{(0)}\mid i\rangle$$

$$\hat{H}_0\mid f\rangle=\hat{H}_0\mid A\rangle\mid 1_{\boldsymbol{k},\lambda}\rangle=(E_A^{(0)}+\omega_k)\mid A\rangle\mid 1_{\boldsymbol{k},\lambda}\rangle=(E_A^{(0)}+\omega_k)\mid f\rangle$$

上面将原子中的电子与电磁场的耦合情形分析清楚后,便可以应用微扰公式(5.1.12)给出跃迁几率幅

$$\lim_{\substack{t'\to\infty\\t\to-\infty}}Amp_{fi}(t',t)=\delta_{fi}-2\pi\mathrm{i}\delta(E_f-E_i)T_{fi}$$

其中

$$T_{fi}=\langle f\mid\hat{V}\mid i\rangle$$

由于现在的$|i\rangle$与$|f\rangle$不是同一能态,δ_{fi}为0,故只需考虑上面公式右方的第二项,因此由$|i\rangle$到所有的末态的总几率是

$$\sum_f P_{fi} = \sum_f |Amp_{fi}|^2 = \sum_f |-2\pi i\delta(E_f - E_i)T_{fi}|^2 \qquad (6.8.6)$$

把其中的一个 $2\pi\delta(E_f - E_i)$写成如下的积分形式

$$2\pi\delta(E_f - E_i) = \lim_{T\to\infty}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathrm{d}t\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_f - E_i)t} \qquad (6.8.7)$$

代入上式，有

$$\sum_f p_{fi} = \sum_f \left[\lim_{T\to\infty}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathrm{d}t\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_f - E_i)t}\right] 2\pi\delta(E_f - E_i) |T_{fi}|^2$$

$$= \sum_f \lim_{T\to\infty} T \cdot 2\pi\delta(E_f - E_i) |T_{fi}|^2 \qquad (6.8.8)$$

得到由$|i\rangle$向所有末态的跃迁几率为

$$\Gamma = \frac{\sum_f P_{fi}}{T} = \sum_f 2\pi\delta(E_f - E_i) |T_{fi}|^2 \qquad (6.8.9)$$

由于现在考虑的是简单的二能级问题，而且要求初态和末态的电子态矢分别是$|B\rangle$，$|A\rangle$且末态中只有一个光子，因此对末态的求和就是对所有的光子的波矢及极化求和

$$\Gamma = \int \mathrm{d}^3 k \sum_\lambda 2\pi\delta(E_A^{(0)} + \omega_k - E_B^{(0)}) |\langle f | \hat{V} | i\rangle|^2 \qquad (6.8.10)$$

因为 $\mathrm{d}^3 k = k^2 \mathrm{d}k \mathrm{d}\Omega$，由上式得单位立体角元内的跃迁几率为

$$\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}\Omega} = \int k^2 \mathrm{d}k \sum_\lambda 2\pi\delta(E_A^{(0)} + \omega_k - E_B^{(0)}) |\langle f | \hat{V} | i\rangle|^2$$

$$= \int \omega_k^2 \mathrm{d}\omega_k \sum_\lambda 2\pi\delta(E_A^{(0)} + \omega_k - E_B^{(0)}) |\langle f | \hat{V} | i\rangle|^2$$

$$= \omega_k^2 \sum_\lambda 2\pi |\langle f | \hat{V} | i\rangle|^2 \qquad (6.8.11)$$

其中

$$\omega_k = E_B^{(0)} - E_A^{(0)}$$

也可表示成

$$\Gamma = \omega_k^2 \sum_\lambda \int \mathrm{d}\Omega 2\pi |\langle f | \hat{V} | i\rangle|^2 \qquad (6.8.12)$$

剩下要计算的是上式右方的矩阵元

$$\langle f | \hat{V} | i\rangle = \langle A | \langle 1_{k\lambda} | \hat{V} | 0\rangle | B\rangle$$

$$= \langle A | \langle 1_{k\lambda} | \left(-\frac{e}{m}\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{p} + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}\cdot\mathbf{A}\right) | B\rangle | 0\rangle$$

$$= \langle A | \langle 1_{k\lambda} | \left(-\frac{e}{m}\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{p}\right) | B\rangle | 0\rangle$$

$$= \langle A | \langle 1_{k\lambda} | \left(-\frac{e}{m}\right) \int \frac{\mathrm{d}^3 k'}{(2\pi)^3} \sum (\hat{\varepsilon}_{k'\lambda'} \hat{a}_{k'\lambda'} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k'\cdot r}$$

$$+\hat{\varepsilon}^*_{k'\lambda'}\hat{a}^+_{k'\lambda'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'\cdot r})\cdot \boldsymbol{p}\mid B\rangle\mid 0\rangle\frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}$$

$$=-\frac{e}{m}\frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}\langle A\mid\hat{\varepsilon}^*_{k\lambda}e^{-\mathrm{i}k\cdot r}\cdot\boldsymbol{p}\mid B\rangle \tag{6.8.13}$$

在得出最后一个等式时利用了末态含一个$(\boldsymbol{k},\lambda)$的光子而初态不含光子的事实，所以只有 $\hat{a}^+_{k\lambda}$ 的矩阵元才有贡献. 根据同一理由，由于 $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}$ 中不含单个的 $\hat{a}$ 或 $\hat{a}^+$，所以它的矩阵元也必须为零. 将(6.8.13)式代入(6.8.12)式，得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}\Omega}&=\frac{\alpha\omega_k}{2\pi m^2}\sum_\lambda\mid\langle A\mid\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot r}\hat{\varepsilon}^*_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{p}\mid B\rangle\mid^2\\ \Gamma&=\frac{\alpha}{2\pi m^2}\omega_k\int\mathrm{d}\Omega\sum_\lambda\mid\langle A\mid\hat{\varepsilon}^*_{k\lambda}\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot r}\cdot\boldsymbol{p}\mid B\rangle\mid^2\end{aligned} \tag{6.8.14}$$

其中 $\alpha=\frac{e^2}{4\pi}$.

6.8.2 偶极近似

对于原子 $k\sim\omega_k\sim 1\mathrm{eV}, r\sim 1\text{Å}$，有 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}\sim 1\mathrm{eV}\times 1\,\frac{1}{\hbar c}\sim\frac{1}{2\,000}\ll 1$，所以在(6.8.14)式中让 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot r}\to 1$ 是一个很好的近似. 这种近似叫做偶极近似.

作偶极近似后，(6.8.14)式中要计算的矩阵元是$\langle B|\boldsymbol{p}|A\rangle$，为计算它将利用以下的关系

$$[\hat{H}_{\mathrm{atom}},\boldsymbol{r}]=\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+e\Phi(r),\boldsymbol{r}\right]=\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m},\boldsymbol{r}\right]=-\mathrm{i}\frac{1}{m}\boldsymbol{p} \tag{6.8.15}$$

因此有

$$\begin{aligned}\langle A\mid\boldsymbol{p}\mid B\rangle&=\mathrm{Im}\langle A\mid[\hat{H}_{\mathrm{atom}},\boldsymbol{r}]\mid B\rangle\\&=\mathrm{Im}\langle A\mid(\hat{H}_{\mathrm{atom}}\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}\hat{H}_{\mathrm{atom}})\mid B\rangle\\&=-\mathrm{Im}(E_B^{(0)}-E_A^{(0)})\langle A\mid\boldsymbol{r}\mid B\rangle\\&=-\mathrm{Im}\omega_k\langle A\mid\boldsymbol{r}\mid B\rangle\end{aligned} \tag{6.8.16}$$

代回(6.8.14)式得

$$\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}\Omega}\cong\frac{\alpha\omega_k{}^3}{2\pi}\sum_\lambda\mid\langle A\mid\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{k}\lambda^*_{k\lambda}\mid B\rangle\mid^2 \tag{6.8.17}$$

这个结果表明，跃迁几率幅的计算最后归结为计算 $\boldsymbol{r}$ 算符在两个原子态$|A\rangle$和$|B\rangle$之间的矩阵元. 为以后讨论方便，现在将位置算符 $\boldsymbol{r}=r_1\hat{e}_x+r_2\hat{e}_y+r_3\hat{e}_z$ 用三个新的单位矢量展开

$$\boldsymbol{r}=r^{(1)}\hat{e}^{(1)}+r^{(0)}\hat{e}^{(0)}+r^{(-1)}\hat{e}^{(-1)} \tag{6.8.18}$$

引入的新的单位矢与原来的单位矢以及新的分量与原来的分量有以下关系

$$\hat{e}^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{e}_x + \mathrm{i}\hat{e}_y) \quad \hat{e}^{(0)} = \hat{e}_z \quad \hat{e}^{(-1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{e}_x - \mathrm{i}\hat{e}_y)$$
$$r^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(r_1 + \mathrm{i}r_2) \quad r^{(0)} = r_3 \quad r^{(-1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(r_1 - \mathrm{i}r_2) \tag{6.8.19}$$

此外，还要将原子态$|A\rangle$，$|B\rangle$用完全的量子数集合表述出来

$$|A\rangle = |A_1, J_A, M_A\rangle$$
$$|B\rangle = |B_1, J_B, M_B\rangle$$

这是因为电子在原子中的定态应由一组算符的完全集来表征，例如$|A_1, J_A, M_A\rangle$表示态中电子的角量子数是J_A，磁量子数是M_A，A_1表征除J_A，M_A外的其余量子数，所以有

$$\langle A \mid \boldsymbol{r} \mid B\rangle = \langle A_1, J_A, M_A \mid (r^{(1)}\hat{e}^{(1)*} + r^{(0)}\hat{e}^{(0)*} + r^{(-1)}\hat{e}^{(-1)*}) \mid B_1, J_B, M_B\rangle \tag{6.8.20}$$

6.8.3 Wigner-Eckart 定理及其选择定则

对于上述的矩阵元可以应用重要的 Wigner-Eckart 定理来加以讨论. 这里不作这个定理的证明，只将定理给出并阐述它的意义及相关的结论. 该定理给出如下的矩阵元表示式

$$\langle A_1, J_A, M_A \mid r^{(k)} \mid B_1, J_B, M_B\rangle = C^{J_B 1; J_A}_{M_B k; M_A} \langle A_1 \mid r \mid B_1\rangle \tag{6.8.21}$$

左边的$r^{(k)}$指$r^{(1)}$，$r^{(0)}$，$r^{(-1)}$中的某一个分量，$C^{J_B 1; J_A}_{M_B k; M_A}$是第二章中已讨论过的 C-G 系数. (6.8.2)式可以这样来理解，其中$r^{(k)}$相当于一个角动量为 1 的分量，它和(J_B, M_B)耦合构成总角动量及其分量(J_A, M_A). 同时，还可以看出在(6.8.19)式中引入新的单位矢量及相应的位置算符新分量的原因，因为这正是 Wigner-Eckart 定理需要的角动量合成的形式.

现在讨论一下这个定理的意义：

(a) 首先，这个定理告诉我们对于不同的(J_A, M_A)，(J_B, M_B)以及不同的$r^{(k)}$，不需要分别去计算，因为按(6.8.21)式有

$$\langle A_1, J_A, M_A \mid r^{(k)} \mid B_1, J_B, M_B\rangle / \langle A_1, J'_A, M'_A \mid r^{(k')} \mid B_1, J'_B, M'_B\rangle = C^{J_B 1; J_A}_{M_B k; J_B} / C^{J'_B 1; J'_A}_{M'_B k'; J'_B}$$

只要算出其中的一个矩阵元，其他的矩阵元均可得出，两者仅相差两个 C-G 系数的比值.

(b) 根据(6.8.21)式及 C-G 系数的性质可以得出其矩阵元是否为零的结论，也即判断两态之间是否可以跃迁的所谓“选择定则”. (6.8.21)式的左方是否为零取决于右方的 C-G 系数是否为零，而(6.8.21)式中的 C-G 系数不为零必须满足以下条件

$$J_B - J_A = 0, \pm 1$$
$$M_B - M_A = - k \tag{6.8.22}$$

只要回忆一下讨论角动量耦合时的内容并将其应用到我们这里的角动量 J_B 和角动量 $J=1$ 合成的情形，就会立即得到(6.8.22)式的结果.

其次，再看一下系统在态间跃迁时宇称的变化. 记 $\hat{\Pi}$ 为宇称算符，即空间的反射算符，它和 $\boldsymbol{r}$ 算符是反对易的

$$\{\hat{\Pi}, \boldsymbol{r}\} = 0 \tag{6.8.23}$$

这是因为对任意的波函 $\psi(\boldsymbol{r})$ 有

$$\hat{\Pi}(\boldsymbol{r}\psi(\boldsymbol{r})) = - \boldsymbol{r}\psi(-\boldsymbol{r}) = - \boldsymbol{r}(\hat{\Pi}\psi(\boldsymbol{r}))$$

即

$$(\hat{\Pi}\boldsymbol{r} + \boldsymbol{r}\hat{\Pi})\psi(\boldsymbol{r}) = 0$$

由于上式对任意波函数都成立，可见(6.8.23)式成立.

根据(6.8.23)式，对电子的任意两个态，$|A\rangle$及$|B\rangle$应有

$$\begin{aligned} 0 &= \langle A \mid \{\hat{\Pi}, \boldsymbol{r}\} \mid B\rangle = \langle A \mid (\hat{\Pi}\boldsymbol{r} + \boldsymbol{r}\hat{\Pi}) \mid B\rangle \\ &= (\pi_A + \pi_B)\langle A \mid \boldsymbol{r} \mid B\rangle \end{aligned}$$

其中 π_A, π_B 分别是状态$|A\rangle$及$|B\rangle$的宇称值，即宇称算符的本征值.

由上式可知，如要$\langle A|\boldsymbol{r}|B\rangle$不为零，必须有 $\pi_A = -\pi_B$. 把以上两点综合起来便得到两个电子定态之间转移的选择定则是

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad \text{及} \quad \text{宇称相反}$$

不过要提醒一点，此处得到的选择定则是建立在偶极近似的基础上的. 如果不取 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \approx 1$ 的近似，则矩阵元为零的跃迁严格地讲仍不是完全禁戒的，只是跃迁几率很小而已.

6.8.4 跃迁几率的进一步计算

利用 Wigner-Eckart 定理讨论了选择定则以后，现在对跃迁几率作进一步的计算. 作为准备先讨论一下光子的两个极化矢量与光子的动量方向矢量之间的一个关系，我们知道 $\hat{\epsilon}_{k_1}, \hat{\epsilon}_{k_2}$ 及动量方向的单位矢量 $\hat{k}$ 是三个互为正交的单位矢量，即

$$(\hat{\epsilon}_{k_1})^* \cdot (\hat{\epsilon}_{k_1}) = (\hat{\epsilon}_{k_2})^* \cdot (\hat{\epsilon}_{k_2}) = (\hat{k})^* \cdot (\hat{k}) = 1$$

以及

$$(\hat{\epsilon}_{k_1})^* \cdot (\hat{\epsilon}_{k_2}) = (\hat{\epsilon}_{k_1})^* \cdot (\hat{k}) = (\hat{\epsilon}_{k_2})^* \cdot (\hat{k}) = 0 \tag{6.8.24}$$

现在把它们合起来写成一个矩阵的形式

$$\begin{pmatrix} (\hat{\varepsilon}_{k_1})_{+1} & (\hat{\varepsilon}_{k_1})_{-1} & (\hat{\varepsilon}_{k_1})_0 \\ (\hat{\varepsilon}_{k_2})_{+1} & (\hat{\varepsilon}_{k_2})_{-1} & (\hat{\varepsilon}_{k_2})_0 \\ (\hat{k})_{+1} & (\hat{k})_{-1} & (\hat{k})_0 \end{pmatrix}$$

其中下标＋1，－1，0 表示每个单位矢量在(6.8.19)式中定义的基矢量 $\hat{\varepsilon}^{(1)}$，$\hat{\varepsilon}^{(-1)}$，$\hat{\varepsilon}^{(0)}$ 上投影的分量. 根据(6.8.24)式知这个矩阵的三个行有正交归一关系，从矩阵的性质可知如它的行有正交归一关系，则它的三个列间必然也有正交归一关系，即

$$\sum_{\lambda=1}^{2} (\hat{\varepsilon}_{k\lambda})_j^* (\varepsilon_{k\lambda})_i + \hat{k}_i^* \hat{k}_j = \delta_{ij} \qquad (i,j=\pm 1,0) \tag{6.8.25}$$

有了以上的讨论我们回到跃迁几率的表示式(6.8.17)

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}\Omega} &= \frac{\alpha}{2\pi}\omega_k^3 \sum_\lambda |\langle A \mid \boldsymbol{r}\cdot\hat{\varepsilon}_{k\lambda}^* \mid B\rangle|^2 \\ &= \frac{\alpha}{2\pi}\omega_k^3 \cdot \sum_\lambda \langle A \mid r_i \mid B\rangle (\hat{\varepsilon}_{k\lambda}^*)_i (\hat{\varepsilon}_{k\lambda})_j \langle A \mid r_j \mid B\rangle^* \\ &= \frac{\alpha}{2\pi}\omega_k^3 (\langle A \mid r_i \mid B\rangle)(\delta_{ij} - \hat{k}_i^* \hat{k}_j^*)(\langle A \mid r_j \mid B\rangle)^* \\ &\equiv \frac{\alpha}{2\pi}\omega_k^3 [(\boldsymbol{M}^* \cdot \boldsymbol{M}) - (\boldsymbol{M}\cdot\hat{k}^*)(\boldsymbol{M}^*\cdot\hat{k})] \end{aligned} \tag{6.8.26}$$

其中

$$\boldsymbol{M} = \langle A \mid \boldsymbol{r} \mid B\rangle$$

现在利用(6.8.21)式的 Wigner-Eckart 定理来讨论上式的两项：

(a)
$$\begin{aligned} \boldsymbol{M}^*\cdot\boldsymbol{M} &= (\langle A|\boldsymbol{r}|B\rangle)^* \cdot (\langle A|\boldsymbol{r}|B\rangle) \\ &= \sum_{j=1,-1,0} (\langle A_1, J_A, M_A | r^{(j)} | B_1, J_B, M_B\rangle)^* \cdot (\langle A_1, J_A, M_A | \\ &\quad r^{(j)} | B_1, J_B, M_B\rangle) \\ &= \sum_{j=1,-1,0} C_{M_B j;M_A}^{J_B 1;J_A} \langle A_1 | r | B_1\rangle^* C_{M_B j;M_A}^{J_B 1;J_A} \langle A_1 | r | B_1\rangle \\ &= \sum_{j=1,-1,0} \left(C_{M_B j;M_A}^{J_B 1;J_A}\right)^2 |\langle A_1 | r | B_1\rangle|^2 \end{aligned} \tag{6.8.27}$$

(b)
$$\begin{aligned} \boldsymbol{M}\cdot\hat{k}^* &= \langle A|r_{+1}|B\rangle(\hat{k}^{(+1)})^* + \langle A|r_{-1}|B\rangle(\hat{k}^{(-1)})^* \\ &\quad + \langle A|r_0|B\rangle(\hat{k}^{(0)})^* \\ &= \left(C_{M_B 1;M_A}^{J_B 1;J_A} \langle A_1|r|B_1\rangle\right)\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\right) \\ &\quad + \left(C_{M_B -1;M_A}^{J_B 1;J_A} \langle A_1|r|B_1\rangle\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\right) \\ &\quad + \left(C_{M_B 0;M_A}^{J_B 1;J_A} \langle A_1|r|B_1\rangle\right)\cos\theta \end{aligned} \tag{6.8.28}$$

在上式的推导中利用了以下关系

$$(\hat{k}^{(+1)})^* = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{k}_x + \mathrm{i}\hat{k}_y)^* = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\sin\theta\cos\varphi - \mathrm{i}\sin\theta\sin\varphi)$$
$$= -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}$$
$$(\hat{k}^{(-1)})^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{k}_x - \mathrm{i}\hat{k}_y)^* = \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi};\quad (\hat{k}^{(0)})^* = \hat{k}_z = \cos\theta$$

由(6.8.28)式可导出

$$(\boldsymbol{M}\cdot\hat{k}^*)(\boldsymbol{M}^*\cdot\hat{k}) = \left[\frac{1}{2}\sin^2\theta\left(C^{J_B1;J_A}_{M_B1;M_A}\right)^2 + \frac{1}{2}\sin^2\theta\left(C^{J_B1;J_A}_{M_B-1;M_A}\right)^2 + \cos^2\theta\left(C^{J_B1;J_A}_{M_B0;M_A}\right)^2\right]|\langle A_1|r|B_1\rangle|^2 \tag{6.8.29}$$

注意，上式右方的三项只是对应于三个对角项，而左方相乘时还有六个对应于 $j_1\neq j_2$ 的交叉项. 不过这些项中所含的因子 $C^{J_B1;J_A}_{M_Bj_1;M_A}\cdot C^{J_B1;J_A}_{M_Bj_2;M_A}=0$，因为两个 C-G 中必有一个不满足 $M_B+j=M_A$，因此这些交叉项为零. 将(6.8.27)及(6.8.29)式代入(6.8.26)式，最后得

$$\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\alpha}{2\pi}\omega_k^3|\langle A_1|r|B_1\rangle|^2\left[\sum_{j=1,-1,0}\left(C^{J_B1;J_A}_{M_Bj;M_A}\right)^2\left(1-\frac{1}{2}\sin^2\theta\right) - \left(C^{J_B1;J_A}_{M_B0;M_A}\right)^2\left(1-\frac{3}{2}\sin^2\theta\right)\right] \tag{6.8.30}$$

现在再作进一步讨论：

(a) (6.8.29)式中的矩阵元 $\langle A_1|r|B_1\rangle$ 随不同的系统而变，所以在一般讨论中是无法计算的；

(b) 实验上感兴趣的情况是不去区分 $|A\rangle$ 态中电子自旋的取向而对它的 $2J_A+1$ 个取向求和. 对于 $|B\rangle$ 态，在制备时已选定它们的取向出现的几率 $p(M_B)$. 因此，实验上感兴趣的跃迁几率是

$$\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\alpha}{2\pi}\omega_k{}^3|\langle A_1|r|B_1\rangle|^2\sum_{M_AM_B}p(M_B)(1-\frac{\sin^2\theta}{2}) \sum_{j=1,-1,0}\left(C^{J_B1;J_A}_{M_Bj;J_A}\right)^2 - \left(1-\frac{3}{2}\sin^2\theta\right)\left(C^{J_B1;J_A}_{M_B0;M_A}\right)^2 \tag{6.8.31}$$

此外，为了进一步简化(6.8.31)式还可利用 C- G 系数的如下性质

$$\sum_{M_Aj}\left(C^{J_B1;J_A}_{M_Bj;M_A}\right)^2 = \frac{2J_A+1}{2J_B+1}$$

$$\left(C^{J_B 1;J_A}_{M_B j;M_A}\right)^2=\delta_{M_A,M_B}\begin{cases}\dfrac{(J_B+1)^2-M_B^2}{(J_B+1)(2J_B+1)} & J_A=J_B+1\\ \dfrac{M_B^2}{J_B(J_B+1)} & J_A=J_B\\ \dfrac{J_B^2-M_B^2}{J_B(2J_B+1)} & J_A=J_B-1\end{cases}$$

将它们代入(6.8.31)式,得

$$\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{\alpha}{2\pi}\omega_k^3\mid\langle A_1\mid r\mid B_1\rangle\mid^2 \cdot\left[\frac{2}{3}\cdot\frac{2J_A+1}{2J_B+1}-\frac{1}{3}\Lambda_{J_B,J_A}\left(1-\frac{3\langle M_B\rangle}{J_B(J_B+1)}\right)\left(1-\frac{3}{2}\sin^2\theta\right)\right] \tag{6.8.32}$$

其中

$$\Lambda_{J_B,J_A}=\begin{cases}\dfrac{J_B}{2J_B+1} & J_A=J_B+1\\ -1 & J_A=J_B\\ \dfrac{J_B+1}{2J_B+1} & J_A=J_B-1\end{cases} \tag{6.8.33}$$

$$\langle M_B^2\rangle=\sum_{M_B}p(M_B)M_B^2$$

这里

$$\sum_B P(M_B)=1 \tag{6.8.34}$$

在(6.8.32)式中剩下要做的是根据具体的系统性质去计算矩阵元$\langle A_1|r|B_1\rangle$.

6.9 原子物理中的应用之二——谱线形状

6.9.1 谱线形状分析

在上一节里讨论的模型是一个过于简化的模型,原子中只有一个电子,它只有两个能态:一个激发态和一个基态.在那里我们讨论了从激发态向基态且只具有一个光子态的跃迁问题.在讨论中还隐含着假定激发态是一个能量全确定的定态.但是电子的激发态既然要向低能态跃迁,可见它就会有一定的寿命,根据 Δt 及 ΔE 间的测不准关系来看它就不会是一个只有完全确定能量的能态,因此从该激发态向低能态跃迁时放射出的光子的能量就会有一定分布,即相应的光谱线会有一定宽度或即谱线有一定的形状.为此我们需要把上面的讨论扩展得广泛一些,并去掉一些较强的限制后再来看看会得到些什么样的新结果.

如前将原子中的电子及辐射场耦合系统的哈密顿量 $\hat{H}$ 分为两部分

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{6.9.1}$$

其中

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{\text{rad}} + \hat{H}_{\text{atom}} \tag{6.9.2}$$

$$\hat{V} = -\frac{e}{m}\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{p} + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}\cdot\mathbf{A} \tag{6.9.3}$$

但现在我们不再假定电子的初始状态一定是某一激发态 $|B\rangle$ 并且没有光子,即

$$|\psi(t=0)\rangle = |B,0\rangle = |B\rangle\,|0\rangle \tag{6.9.4}$$

且有

$$\hat{H}_0\,|B,0\rangle = E_B^{(0)}\,|B,0\rangle \tag{6.9.5}$$

也不再假定除此之外只有一个基态及一个光子的态,而是扩展为考虑电子具有一组普遍的原子—光子态 $|n\rangle$,它们满足

$$\hat{H}_0\,|n\rangle = E_n^{(0)}\,|n\rangle \tag{6.9.6}$$

并有完备性关系

$$|n\rangle\langle n| = 1 \tag{6.9.7}$$

因此 $t=0$ 时的任何初始状态总可以用完备集 $\{|n\rangle\}$ 来展开

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_n C_n(0)\,|n\rangle \tag{6.9.8}$$

其中

$$C_n(0) = \langle n\,|\,\psi(t=0)\rangle \tag{6.9.9}$$

如果 $\hat{V}=0$,则任一时刻 t 的 $|\psi(t)\rangle$ 为

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t}\,|\psi(t=0)\rangle = \sum_n C_n(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t}\,|n\rangle \\ &= \sum_n C_n(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{(0)} t}\,|n\rangle\end{aligned} \tag{6.9.10}$$

如果 $\hat{V}\neq 0$,随时间变化的 $\psi(t)\rangle$ 这时应是 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}|\psi(t=0)\rangle$,当然就不会是(6.9.10)式所表示的形式,不过在 $\hat{V}$ 是扰动的情况下总可用 $\{|n\rangle\}$ 来展开

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{(0)} t}\,|n\rangle \tag{6.9.11}$$

只是这时的系数 $C_n(t)$ 不再是 $C_n(0)$,而是随 t 改变且可由以下的微分方程决定

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}C_n(t) = \sum_m \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_n^{(0)}-E_m)t}\langle n\,|\,\hat{V}\,|\,m\rangle C_m(t) \tag{6.9.12}$$

证明如下:

$|\psi(t)\rangle$ 应满足薛定谔方程

$$\mathrm{i}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mid \psi(t)\rangle = \hat{H}\mid \psi(t)\rangle = (\hat{H}_0+\hat{V})\mid \psi(t)\rangle$$

将(6.9.11)式代入上式得

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mid \psi(t)\rangle &= \mathrm{i}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_m C_m(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m^{(0)}t}\mid m\rangle \\
&= \mathrm{i}\sum_m \frac{\mathrm{d}C_m(t)}{\mathrm{d}t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m^{(0)}t}\mid m\rangle + \mathrm{i}\sum_m C_m(t)(-\mathrm{i}E_m^{(0)})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m^{(0)}t}\mid m\rangle \\
&= (\hat{H}_0+\hat{V})\sum_M C_m(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m^{(0)}t}\mid m\rangle \\
&= \sum_m E_m^{(0)}C_m(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m^{(0)}t}\mid m\rangle + \sum_m C_m(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m^{(0)}t}\hat{V}\mid m\rangle
\end{aligned}$$

左右两方消去相同的项后得

$$\mathrm{i}\sum_m\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}C_m(t)\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m^{(0)}t}\mid m\rangle = \sum_m C_m(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m^{(0)}t}\hat{V}\mid m\rangle$$

将上式左右两端左乘以$\langle n|$，利用正交归一关系

$$\langle n\mid m\rangle = \delta_{nm}$$

便可得到(6.9.12)式.

6.9.2 近似解法

(6.9.12)式虽然是严格的，但是不同$\{C_n(t)\}$的无穷多个方程的耦合方程组是无法严格求解的. 不过针对本节一开始谈到的由(6.9.5)式表示的那种特定的初始状态，$C_n(0)=\delta_{nB}$，同时又考虑到$\hat{V}$是扰动的情形，因此可将(6.9.12)式的严格的耦合方程近似地写成

$$\begin{aligned}
&\mathrm{i}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}C_n(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_n^{(0)}-E_B^{(0)})t}\langle n\mid \hat{V}\mid B,0\rangle C_B(t) \\
&\mathrm{i}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}C_B(t) = \langle B,0\mid \hat{V}\mid B,0\rangle C_B(t) + \sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_B^{(0)}-E_n^{(0)})t}\langle B,0\mid \hat{V}\mid n\rangle C_n(t)
\end{aligned} \tag{6.9.13}$$

上面的第二式是严格的. 第一式的近似在于虽然随着t的发展，$|n\rangle\neq|B,0\rangle$的其他态占据几率不再为零，但毕竟是小量，所以只取初始时的$|B,0\rangle$态而略去其他态的贡献.

引入如下的定义

$$C_B(t)\equiv \widetilde{C}_B(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Lambda t} \tag{6.9.14}$$

其中

$$\Lambda = \langle B,0\mid \hat{V}\mid B,0\rangle \tag{6.9.15}$$

并且定义

$$\widetilde{E}_B = E_B^{(0)} + \Lambda \tag{6.9.16}$$

可将(6.9.13)式简化为

$$\begin{aligned} &\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}C_n = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B)t}\langle n \mid \hat{V} \mid B,0\rangle \widetilde{C}_B \\ &\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widetilde{C}_B = \sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\widetilde{E}_B - E_n)t}\langle B,0 \mid \hat{V} \mid n\rangle C_n \end{aligned} \tag{6.9.17}$$

为了解上述的方程组,假定 $\widetilde{C}_B(t)$ 取随 t 呈指数衰减的形式

$$\widetilde{C}_B(t) = \mathrm{e}^{-\gamma t}, \quad \mathrm{Re}\,\gamma > 0 \tag{6.9.18}$$

上述形式保证 $C_B(0)=1$. 这种假定的正确性将通过最后得出的解来加以证实.

因此(6.9.17)式的第一式成为

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}C_n = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B+\mathrm{i}\gamma)t}\langle n \mid \hat{V} \mid B,0\rangle \tag{6.9.19}$$

积分后有

$$\begin{aligned} C_n(t) &= -\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t'\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B+\mathrm{i}\gamma)t'}\langle n \mid \hat{V} \mid B,0\rangle \\ &= \frac{1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B+\mathrm{i}\gamma)t}}{E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B+\mathrm{i}\gamma}\langle n \mid \hat{V} \mid B,0\rangle \end{aligned} \tag{6.9.20}$$

其中用到了 $C_n(t=0)=0$ 的初始条件. 再将(6.9.18)式代入(6.9.17)式的第二式的左方,(6.9.20)式代入(6.9.17)式的第二式的右方,得

$$-\mathrm{i}\gamma\mathrm{e}^{-\gamma t} = \sum_n |\langle n \mid \hat{V} \mid B,0\rangle|^2 \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B)t} - \mathrm{e}^{-\gamma t}}{E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B+\mathrm{i}\gamma} \tag{6.9.21}$$

因为 $|n\rangle$ 中所含的不同光子能谱是连续改变的,所以不同的 $|n\rangle$ 的 $E_n^{(0)}$ 是连续改变的,如记 $f(E_n^{(0)}) = |\langle n|\hat{V}|B,0\rangle|^2$,则在(6.9.21)式中对 n 的求和实质上是对 $\mathrm{d}E_n^{(0)}$ 的积分. 例如,(6.9.21)式右方的第一项是

$$\int_{E_A}^{\infty}\mathrm{d}E_n^{(0)} f(E_n^{(0)})\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B)t}}{E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B+\mathrm{i}\gamma} \tag{6.9.22}$$

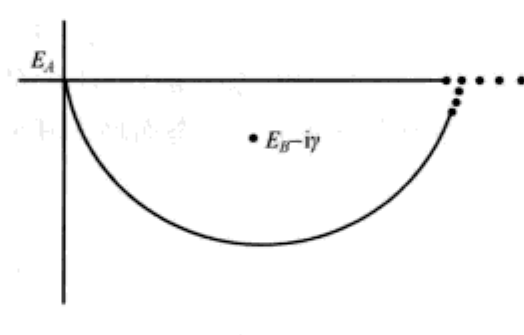


图 6.5

由于上面的积分中有 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{(0)}t}$ 的指数因子,为此类似于前面的做法在实数轴上加上下大半圆构成积分回路. 不过要注意的是,虽然由于有 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{(0)}t}$ 的指数因子,在下大半圆上大部分地方 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{(0)}t}\to 0$,但是这里和左右都趋于无穷的情形还是不一样. 这里的左端在 E_A 而不是在 $-\infty$ 处,所以下大半圆在 E_A 附近仍有一定的贡献. 因此这里还需作一个忽略掉这个小的贡献的近似,然后才能利用留数定理得到

$$\int_{E_A}^{\infty} dE_n^{(0)} f(E_n^{(0)}) e^{-i(E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B)t} \frac{1}{E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B+i\gamma} \cong -2\pi i f(\widetilde{E}_B - i\gamma) e^{-\gamma t} \tag{6.9.23}$$

由于 γ 比起 $\widetilde{E}_B$ 来小很多，可以作近似 $f(\widetilde{E}_B - i\gamma) \cong f(\widetilde{E}_B)$，因此上式右方可写作

$$\begin{aligned}&\int_{E_A}^{\infty} dE_n^{(0)} f(E_n^{(0)}) e^{-i(E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B)t} \frac{1}{E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B+i\gamma} \\ &\cong -2\pi i e^{-\gamma t} \int_{E_A}^{\infty} dE_n^{(0)} \delta(E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B) f(E_n^{(0)})\end{aligned} \tag{6.9.24}$$

代回(6.9.21)式得

$$-i\gamma e^{-\gamma t} = -e^{-\gamma t} \sum_n |\langle n|\hat{V}|B,0\rangle|^2 \left[2\pi i\delta(E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B) + \frac{1}{E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B+i\gamma}\right] \tag{6.9.25}$$

在前面已知有如下的关系

$$\frac{1}{E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B-i\gamma} = P\frac{1}{E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B} - i\pi\delta(\widetilde{E}_B - E_n^{(0)})$$

$$\frac{1}{E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B+i\gamma} = P\frac{1}{E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B} + i\pi\delta(\widetilde{E}_B - E_n^{(0)})$$

两式相减可得

$$\begin{aligned}\frac{1}{E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B+i\gamma} + 2\pi i\delta(\widetilde{E}_B - E_n^{(0)}) &= \frac{1}{E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B-i\gamma} \\ &= P\frac{1}{E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B} + i\pi\delta(\widetilde{E}_B - E_n^{(0)})\end{aligned} \tag{6.9.26}$$

于是(6.9.25)式可改写成

$$-i\gamma = -\sum_n |\langle n|\hat{V}|B,0\rangle|^2 \left(P\frac{1}{E_n^{(0)}-\widetilde{E}_B} + i\pi\delta(\widetilde{E}_B - E_n^{(0)})\right) \tag{6.9.27}$$

由上式知，γ 的实部与虚部可分别表示为

$$\mathrm{Re}\,\gamma = \sum_n \pi\delta(\widetilde{E}_B - E_n)|\langle n|\hat{H}_1|B,0\rangle|^2 = \frac{1}{2}\Gamma_B$$

这里引入了记号 Γ_B.

$$\mathrm{Im}\gamma = \sum_n |\langle n|\hat{V}|B,0\rangle|^2 P\frac{1}{\widetilde{E}_B - E_n} \tag{6.9.28}$$

以上的推导证明了在所作的近似下，$\widetilde{C}_B(t) = e^{-\gamma t}$ 形式的解的假定得到了验证，因为最终我们得到了自洽的解，即求出了 γ. 不过，结果也告诉我们 γ 是一个复数而

不是实数. 再代回(6.9.14),(6.9.15)及(6.9.16)式,得

$$C_B(t) = \exp[-\mathrm{i}\Lambda t - \mathrm{Re}\,\gamma t - \mathrm{i}\mathrm{Im}\gamma t]$$

$$= \exp\left[-\mathrm{i}(\langle B,0 \mid \hat{V} \mid B,0\rangle t + \mathrm{Im}\gamma)t - \frac{1}{2}\Gamma_B t\right] \tag{6.9.29}$$

把(6.9.29)式代回(6.9.11)式,得

$$\mid \psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_B^{(0)}+\Lambda+\mathrm{Im}\gamma)t}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\Gamma_B t} \mid B,0\rangle + \cdots \tag{6.9.30}$$

上面的公式需要稍加解释. 因为不去讨论展开式中的$|n\rangle \neq |B,0\rangle$的态,而只关心随着$t$的发展系统仍停留在$|B,0\rangle$的情形,所以在上式的右方未写出和那些态矢有关表示. 将(6.9.30)式与$\hat{V}=0$时的

$$\mid \psi_0(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_B^{(0)}t} \mid B,0\rangle + \cdots$$

相比较会得到一些有意义的结论.

(a) 在$\hat{V}\neq 0$时,原来$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_B^{(0)}t}$的因子代之以$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_B^{(0)}+\Lambda+\mathrm{Im}\gamma)t}$,这就说明在有$\hat{H}_1$时能级$|B\rangle$的能量有了变动$\Delta E_B$

$$\Delta E_B = \Lambda + \mathrm{Im}\gamma = \langle B,0 \mid \hat{V} \mid B,0\rangle + \mathrm{Im}\gamma \tag{6.9.31}$$

与微扰论的能量修正相比可知,$\langle B,0|\hat{V}|B,0\rangle = \Delta E_B^{(1)}$ 是能量的一级修正,所以$\mathrm{Im}\gamma = \Delta E_B{}^{(2)}$是能量的二级修正.

(b) 不仅如此,(6.9.30)式中的$\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\Gamma_B t}$因子表示$|B,0\rangle$的几率振幅的指数型衰减,$\dfrac{1}{\Gamma_B}$就是一般情形下定义的寿命.

最后再讨论一下谱线的形状问题. 为具体及简化起见,仍近似讨论向态$|A,\boldsymbol{k}\rangle \equiv |A\rangle|1_{\boldsymbol{k}\lambda}\rangle$跃迁的情形,由(6.9.20)式及$|n\rangle = |A\rangle|1_{\boldsymbol{k}\lambda}\rangle E_n = E_A + \omega_k$ 及上面有关γ的分析,这时的$C_n(t)$,即$C_{A,\boldsymbol{k}(t)}$为

$$C_{A,\boldsymbol{k}}(t) = \frac{1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_A^{(0)}+\omega_k - E_B^{(0)} - \Delta E_B)t} \cdot \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\Gamma_B t}}{E_A^{(0)} + \omega_k - E_B^{(0)} - \Delta E_B + \mathrm{i}\dfrac{1}{2}\Gamma_B}\langle A,\boldsymbol{k} \mid \hat{V} \mid B,0\rangle$$

当时间足够长后$\Gamma_B t \gg 1$,上式分子中的第二项比起1来可以略去,同时记

$$\omega_{AB} = E_B^{(0)} + \Delta E_B - E_A^{(0)} \tag{6.9.32}$$

在t足够长时,有

$$\mid C_{A,\boldsymbol{k}}(t) \mid^2 \cong \frac{\mid \langle A,\boldsymbol{k} \mid \hat{V} \mid B,0\rangle \mid^2}{(\omega_A - \omega_{AB})^2 + \dfrac{1}{4}\Gamma_B} \tag{6.9.33}$$

现在可以根据(6.9.33)式来讨论谱线的形状了. 出现所谓的谱线形状的物理根源就是从$|B\rangle$到$|A\rangle$跃迁过程中发出的光子不是单一频率的. 如不问光子的传播方向,只问它随频率的分布,则谱线的频率分布按(6.9.33)式写出为

$$P(\omega_k)\mathrm{d}\omega_k=\frac{\omega_k^2\mathrm{d}\omega_k}{(2\pi)^3}\sum_\lambda\int\mathrm{d}\Omega\frac{|\langle A,\boldsymbol{k}\lambda\,|\,\hat{V}\,|\,B,0\rangle|^2}{(\omega_k-\omega_{AB})^2+\frac{1}{4}\Gamma_B}\tag{6.9.34}$$

因为我们关心的是谱线的大致分布情形，而不拘泥于精确性，所以可把缓慢变化的分母提出积分号，剩下对分子部分的求和与对角度的积分与(6.9.27)式作比较. 这时将(6.9.27)式中的$|n\rangle$取为$|A,\boldsymbol{k}\lambda\rangle$且将求和转变成$\int\mathrm{d}\omega_k\mathrm{d}\Omega$. 由于右方的$\delta$函数，对$\omega$的积分可积出，再忽略掉$E_{Ak}{}^{(0)}$与$\tilde{E}_B$间的差别，可得

$$P(\omega_k)\mathrm{d}\omega_k\cong\frac{\Gamma_B}{2}\frac{\mathrm{d}\omega_k}{(\omega_k-\omega_{AB})^2+\frac{1}{4}{\Gamma_B}^2}\tag{6.9.35}$$

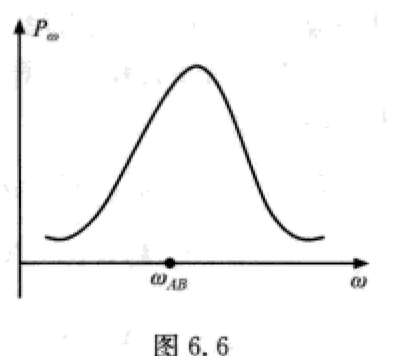


图 6.6

由上式看出，这种谱线形状是洛仑兹型的分布(见图 6.6)，其谱线宽度$\Delta\omega_k\sim\Gamma_B$.

6.10　用费曼图讨论谱线

前面讨论了激发态$|B\rangle$跃迁到基态$|A\rangle$发射出光子的效率问题，用的是Wigner和 Weisskopf 提出的演化办法，其物理图像很清楚，但不足之处是这不是一种系统的方法，处理的手法与具体问题的特定条件有密切的关联. 其次是取近似的依据也有些不自洽的地方. 例如，近似的耦合方程组(6.9.13)是建立在演化时间不长，系统主要还居于$|B\rangle$态上，即跃迁到$|A\rangle$态的几率不大的基础上，时间过长后显然将不再满足这样的近似条件，而在后面取$\Gamma_B t\gg1$与这种近似假定相抵触. 处理这类问题，可能用系统的费曼图及相应的费曼规则方法来讨论可能更好些.

6.10.1　康普顿散射

作为准备，先讨论与这一问题有关联的光子与原子的散射问题——康普顿散射.

电磁场与原子的耦合系统的哈密顿量仍如(6.9.1)，(6.9.2)及(6.9.3)式所示，考虑光子与原子的散射，即假定耦合系统的初态是

$$|\Phi_i\rangle=|A\rangle\,|\,\boldsymbol{k}_i,\hat{\varepsilon}_i\rangle\tag{6.10.1}$$

其中$|A\rangle$是原子中电子的状态，$|\boldsymbol{k}_i,\hat{\varepsilon}_i\rangle$表示波矢为$\boldsymbol{k}_i$，极化矢量为$\hat{\varepsilon}_i$的光子态矢，这一状态在相互作用起作用之前是$\hat{H}_0$的本征态，即$E_i=E_A^{(0)}+\omega_i$. 相互作用以后，散射末态是$|\Phi_f\rangle=|B\rangle|\boldsymbol{k}_f,\hat{\varepsilon}_f\rangle$，$E_f=E_B^{(0)}+\omega_f$. 根据前面讨论过的内容知，从$|\Phi_i\rangle$到$|\Phi_f\rangle$的跃迁几率幅应是

$$
\begin{aligned}
Amp_{fi} &= \lim_{\substack{t' \to \infty \\ t \to -\infty}} e^{iE_f t'} \langle \boldsymbol{k}_f, \hat{\varepsilon}_f \mid \langle B \mid \hat{U}(t', t) \mid A \rangle \mid \boldsymbol{k}_i, \hat{\varepsilon}_i \rangle e^{-iE_i t} \\
&= \delta_{fi} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) F(E_i)
\end{aligned} \tag{6.10.2}
$$

其中的 $F(E_i)$是按 $\hat{V}$ 的幂展开的微扰序列，$\hat{V}=-\frac{e}{m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}+\frac{e^2}{2m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}$ 中的第一项对一级微扰无贡献，只有第二项才有，这是因为初末态都含一个光子，而 $\boldsymbol{A}$ 中只含有一个光子的湮灭和产生算符，只有 $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}$ 在这样的初末态中的矩阵元才不为零.于是，有

$$
\begin{aligned}
F^{(1)}(E_i) &= \langle \Phi_f \mid \hat{V} \mid \Phi_i \rangle \\
&= \langle \boldsymbol{k}_f, \hat{\varepsilon}_f \mid \langle B \mid \frac{e^2}{2m} \frac{e^{i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_f)\cdot \boldsymbol{r}}}{\sqrt{2\omega_f \cdot 2\omega_i}} \hat{\varepsilon}_f^* \cdot \hat{\varepsilon}_i (\hat{a}_{\boldsymbol{k}_i, \hat{\varepsilon}_i} \hat{a}^+_{\boldsymbol{k}_f, \hat{\varepsilon}_f} + \hat{a}^+_{\boldsymbol{k}_f, \hat{\varepsilon}_f} \hat{a}_{\boldsymbol{k}_i, \hat{\varepsilon}_i}) \\
&\quad \mid A \rangle \mid \boldsymbol{k}_i, \hat{\varepsilon}_i \rangle \\
&\approx \frac{e^2}{2m} 2\hat{\varepsilon}_f^* \cdot \hat{\varepsilon}_i \frac{1}{\sqrt{2\omega_f 2\omega_i}} \langle B \mid A \rangle = \delta_{BA} \frac{e^2}{2m} 2\hat{\varepsilon}_f^* \cdot \hat{\varepsilon}_i \frac{1}{2\omega_i}
\end{aligned} \tag{6.10.3}
$$

注意上式的第一等式中已考虑到 $\hat{a}\hat{a}$ 和 $\hat{a}^+\hat{a}^+$ 的矩阵元也为零.

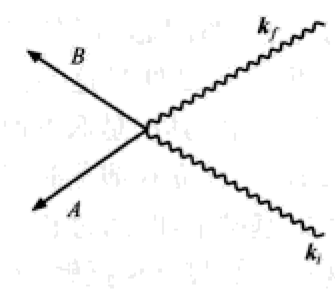


图 6.7

上面的近似等式的得来是如前取了长波近似，$e^{i(\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_f)\cdot\boldsymbol{r}}\approx 1$ 的结果.

可以引入费曼图来形象地描述以上的一级微扰的康普顿散射，其规则是

(a) 光子以～～～～表示；

(b) 原子中的电子线以——→——表示；

(c) $\langle\Phi_f|\hat{V}|\Phi_i\rangle$表示为╳（见图 6.7).

按前面的讨论，二级微扰为

$$
F^{(2)}(E_i) = \sum_k \frac{\langle \Phi_f \mid \hat{V} \mid \Phi_k \rangle \langle \Phi_k \mid \hat{V} \mid \Phi_i \rangle}{E_i - E_k + i\epsilon} \tag{6.10.4}
$$

这时，$\hat{V}$ 中的$\sim\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}$ 项会有贡献，$\frac{e^2}{2m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}$ 也会有贡献.

由于$|\Phi_i\rangle$，$|\Phi_f\rangle$中都含一个光子，所以(6.10.4)式的两个矩阵中的 $\hat{V}$ 要么都取第一项，要么都取第二项，而一个取第一项另一个取第二项的交叉不会有贡献.不过，两个 $\hat{V}$ 都取第二项的贡献$\sim e^4$，所以如果我们只考虑微扰到 e^2 项，就只需要讨论两个矩阵元中的 $\hat{V}$ 都取 $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}$ 的项.这种贡献也有两类不同的中间过程，它们分别是

$$\sum_I \left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{1}{\sqrt{2\omega_f 2\omega_i}} \frac{\langle B \mid e^{-ik_f\cdot r}\hat{\varepsilon}_f^* \cdot \boldsymbol{p} \mid I\rangle\langle I \mid e^{ik_i\cdot r}\hat{\varepsilon}_i \cdot \boldsymbol{p} \mid A\rangle}{E_A^{(0)} + \omega_i - E_I^{(0)} + i\varepsilon} \tag{6.10.5}$$

及

$$\sum_I \left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{1}{\sqrt{2\omega_f 2\omega_i}} \frac{\langle B \mid e^{ik_i\cdot r}\hat{\varepsilon}_i \cdot \boldsymbol{p} \mid I\rangle\langle I \mid e^{-ik_f\cdot r}\hat{\varepsilon}_f^* \cdot \boldsymbol{p} \mid A\rangle}{E_A^{(0)} - E_I^{(0)} - \omega_f + i\varepsilon} \tag{6.10.6}$$

同样地取长波极限近似 $e^{-ik_f\cdot r}\approx 1, e^{ik_i\cdot r}\approx 1$,故上两式可简化为

$$\sum_I \left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{1}{\sqrt{2\omega_f 2\omega_i}} \frac{\langle B \mid \hat{\varepsilon}_f^* \cdot \boldsymbol{p} \mid I\rangle\langle I \mid \hat{\varepsilon}_i \cdot \boldsymbol{p} \mid A\rangle}{E_A^{(0)} + \omega_i - E_I^{(0)} + i\varepsilon} \tag{6.10.7}$$

$$\sum_I \left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{1}{\sqrt{2\omega_f 2\omega_i}} \frac{\langle B \mid \hat{\varepsilon}_i \cdot \boldsymbol{p} \mid I\rangle\langle I \mid \varepsilon_f^* \cdot \boldsymbol{p} \mid A\rangle}{E_A^{(0)} - E_I^{(0)} - \omega_f + i\varepsilon} \tag{6.10.8}$$

现在对上面给出的结果作一些说明:

(a) 第一种贡献的物理过程是第一个 $\hat{V}$ 的作用湮灭掉$(\boldsymbol{k}_i,\hat{\varepsilon}_i)$的光子,使中间态成为不含光子的纯电子态$|I\rangle$,然后第二个 $\hat{V}$ 产生$(\boldsymbol{k}_f\cdot\hat{\varepsilon}_f)$的光子. 第二种贡献的物理过程是第一个 $\hat{V}$ 再产生一个$(\boldsymbol{k}_f,\hat{\varepsilon}_f)$的光子,使中间态成为含电子态$|I\rangle$及两个光子的态,然后第二个 $\hat{V}$ 湮没掉一个$(\boldsymbol{k}_i,\hat{\varepsilon}_i)$的光子.

(b) 由于第一种贡献和第二种贡献的过程不同,所以中间态的能量分别为 $E_I^{(0)}$ 和 $E_I^{(0)}+\omega_i+\omega_f$,它们的分母分别是$(E_A^{(0)}+\omega_i)-E_I^{(0)}+i\varepsilon$ 和$(E_A^{(0)}+\omega_i)-(E_I^{(0)}+\omega_i+\omega_f)-i\varepsilon=E_A^{(0)}-E_I^{(0)}-\omega_f+i\varepsilon$.

(c) 根据以上的分析可以画出它们相应的费曼图,如图 6.8 所示.

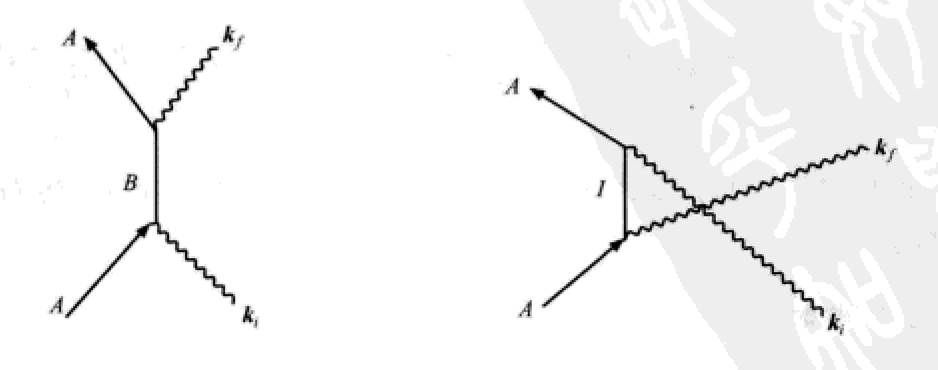


图 6.8

(d) 有了费曼图的帮助,即使不作具体的计算都可以用物理的考虑画出高一级贡献对应的费曼图来. 例如,在图 6.9 中按费曼图规则可以画出$\sim e^4$ 的图形来.

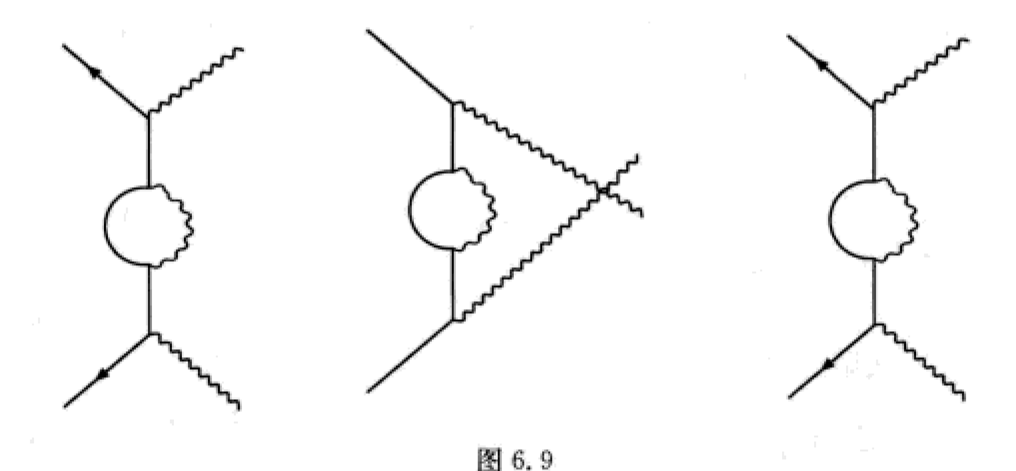


图 6.9

将到 e^2 为止的对 $F(E_i)$ 有贡献的(6.10.3),(6.10.7),(6.10.8)式加起来,得

$$F(E_i)=\frac{e^2}{m\sqrt{2\omega_f 2\omega_i}}\Big[\hat{\varepsilon}_f^*\cdot\hat{\varepsilon}_i\langle B\mid A\rangle$$

$$+\frac{1}{m}\sum_I\frac{\hat{\varepsilon}_f^*\cdot\boldsymbol{p}_{BI}\hat{\varepsilon}_i\cdot\boldsymbol{p}_{IA}}{E_A^{(0)}-E_I^{(0)}+\omega_i+\mathrm{i}\varepsilon}+\frac{1}{m}\sum_I\frac{\hat{\varepsilon}_i\cdot\boldsymbol{p}_{BI}\hat{\varepsilon}_f^*\cdot\boldsymbol{p}_{IA}}{E_A^{(0)}-E_I^{(0)}-\omega_f+\mathrm{i}\varepsilon}\Big] \tag{6.10.9}$$

其中

$$\boldsymbol{p}_{BI}=\langle B\mid\boldsymbol{p}\mid I\rangle,\quad \boldsymbol{p}_{IA}=\langle I\mid\boldsymbol{p}\mid A\rangle \tag{6.10.10}$$

有了 $F(E_i)$,按前面的讨论,微分散射截面即可表示为

$$\mathrm{d}\sigma=\int\mid F(E_i)\mid^2 2\pi\delta(E_f-E_i)\frac{\mathrm{d}^3k_f}{(2\pi)^3} \tag{6.10.11a}$$

以及

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_f}=r_0{}^2\frac{\omega_f}{\omega_i}\mid\hat{\varepsilon}_f^*\cdot\hat{\varepsilon}_i\langle B\mid A\rangle+\frac{1}{m}\sum_I\left(\frac{\hat{\varepsilon}_f^*\cdot\boldsymbol{p}_{BI}\hat{\varepsilon}_i\cdot\boldsymbol{p}_{IA}}{E_A^{(0)}-E_I^{(0)}+\omega_i}+\frac{\hat{\varepsilon}_i\cdot\boldsymbol{p}_{BI}\hat{\varepsilon}_f^*\cdot p_{IA}}{E_A^{(0)}-E_I^{(0)}-\omega_f}\right)\Bigg|^2 \tag{6.10.11b}$$

上式的结果是将(6.10.9)式代入(6.10.11a)式,再仿照(6.7.13)式将 $k\mathrm{d}k$ 化为 $\omega\mathrm{d}\omega$ 得来的.

6.10.2 共振散射

现在考虑一个重要的特殊情形——共振散射,即入射光子的频率与 $|A\rangle$, $|B\rangle$ 两态的能量差几乎相等,即 $\omega_i\approx E_B-E_A$. 这种情况和经典力学中讨论的受迫振动频率和固有振动频率相近时的共振现象相似.

首先可从(6.10.7)式看出在近共振时,其中的中间态 $|I\rangle=|B\rangle|0\rangle$ 的那一项的分母

$$\frac{1}{E_A^{(0)}-\omega_i-E_I^{(0)}+\mathrm{i}\varepsilon}=\frac{1}{E_A{}^{(0)}-\omega_i-E_B^{(0)}+\mathrm{i}\varepsilon}$$

变得特别大，而其他的中间态 $|I\rangle$ 的贡献均可略去. 不仅如此，连(6.10.8)式的贡献也可略去. 因此，在近共振时只需考虑如图 6.10 所示的一个费曼图.

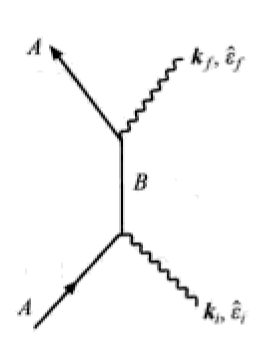


图 6.10

从 $\frac{1}{E_A^{(0)}-\omega_i-E_B^{(0)}+\mathrm{i}\varepsilon}$ 来看，中间态 $|B\rangle|0\rangle$ 的传播会趋于无穷($\omega_i\approx E_B^{(0)}-E_A^{(0)}$).

这和经典力学中如不考虑耗散机制则共振时会发散的情形相似. 那么，在现在的情形下又怎样才能使中间态 $|B\rangle|0\rangle$ 的传播子不会发散呢? (6.10.9)式描述的 $F(E_i)$ 只计算到 e^2，而实际上从前面的讨论知道还有许多高阶的微扰贡献. 在非共振的情形下，它们的贡献是可以忽略的，但在共振情形下传播子要发散时，高阶的修正项就不能丢弃不管了，因为只有考虑了它们后发散才能消除. 这就是量子力学情形下的耗散机制. 不过，在考虑高阶修正时也只需讨论对中间态 $|B\rangle|0\rangle$ 的传播子的高阶修正. 图 6.11 中用▨符号表示所有高阶修正图的总和.

图 6.11

如把没有考虑高阶修正的 $|B\rangle|0\rangle$ 的裸传播子写作

$$-\mathrm{i}\langle 0\mid B\mid \hat{k}^{(0)}(\omega)\mid B\rangle\mid 0\rangle=\frac{1}{\omega-E_B^{(0)}+\mathrm{i}\varepsilon}\tag{6.10.12}$$

则完整的传播子为

$$\begin{aligned}
&-\mathrm{i}\langle 0\mid B\mid \hat{k}(\omega)\mid B\rangle\mid 0\rangle\\
&=\frac{1}{\omega-E_B^{(0)}+\mathrm{i}\varepsilon}\\
&\quad+\frac{1}{\omega-E_B^{(0)}+\mathrm{i}\varepsilon}\langle 0\mid B\mid \hat{V}\mid B\rangle\mid 0\rangle\frac{1}{\omega-E_B^{(0)}+\mathrm{i}\varepsilon}\\
&\quad+\frac{1}{\omega-E_B^{(0)}+\mathrm{i}\varepsilon}\langle 0\mid\langle B\mid \hat{V}\frac{1}{\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon}\hat{V}\mid B\rangle\mid 0\rangle\frac{1}{\omega-E_B^{(0)}+\mathrm{i}\varepsilon}+\cdots
\end{aligned}\tag{6.10.13}$$

现在仔细分析一下上式右方的第二项及第三项.

(a) 第二项的两端的 $\frac{1}{\omega-E_B^{(0)}+\mathrm{i}\varepsilon}$ 就是两端的裸传播子. 中间的 $\langle 0|\langle B|\hat{V}|B\rangle|0\rangle$ 不为零的是 $\hat{V}$ 的第二项 $\hat{V}_2=\frac{e^2}{2m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}$ 的矩阵元.

$$\Lambda \equiv \langle B \mid \langle 0 \mid \hat{V}_2 \mid B \rangle \mid 0 \rangle = \frac{e^2}{m} \sum_{\rho} \langle B \mid \langle 0 \mid a_\rho a_\rho^+ \mid B \rangle \mid 0 \rangle \frac{1}{2\omega_\rho}$$

$$= \frac{e^2}{2m} \sum_{\rho} \frac{1}{2\omega_\rho} \tag{6.10.14}$$

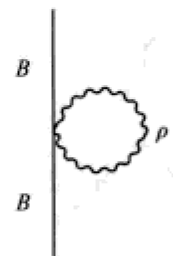


图 6.12

在上式的推导中重复地将 **A** 的表示式代入. **A** · **A** 中含的四类项 $a_\rho a_{\rho'}$, $a_\rho^+ a_{\rho'}$, $a_\rho^+ a_{\rho'}^+$ 取矩阵元时都为零，而 $a_\rho a_{\rho'}^+$ 两重求和也因只有 $\rho=\rho'$ 的情形有贡献，其余的 $\rho\neq\rho'$ 的贡献也都为零. (6.10.14)式的这种贡献不为零的费曼图如图 6.12 所示.

(b) 考虑(6.10.13)式的第三项中的矩阵元，它要不为零一定是其中的两个 $\hat{V}$ 都取 $\hat{V}_1$ 的情形，即

$$\langle 0 \mid \langle B \mid \hat{V}_1 \frac{1}{\omega - \hat{H}_0 + \mathrm{i}\varepsilon} \hat{V}_1 \mid B \rangle \mid 0 \rangle$$

$$= \langle 0 \mid \langle B \mid \left(-\frac{e}{m}\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{p}\right) \frac{1}{\omega - \hat{H}_0 + \mathrm{i}\varepsilon} \mid \left(-\frac{e}{m}\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{p}\right) \mid B \rangle \mid 0 \rangle$$

$$= \frac{e^2}{m^2} \sum_{\lambda_\rho} \int \frac{\mathrm{d}^3 k_\rho}{(2\pi)^3} \langle 0 \mid \langle B \mid (\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{p}) \frac{1}{\omega - \hat{H}_0 + \mathrm{i}\varepsilon} \mid I \rangle \mid \boldsymbol{k}_\rho \lambda_\rho \rangle$$

$$\langle I \mid \langle \boldsymbol{k}_\rho \lambda_\rho \mid (\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{p}) \mid B \rangle \mid 0 \rangle$$

$$= \frac{e^2}{m^2} \sum_{\lambda_g} \int \frac{\mathrm{d}^3 k_\rho}{(2\pi)^3} \langle 0 \mid \langle B \mid (\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{p})$$

$$\cdot (\mid I \rangle \mid \boldsymbol{k}_\rho \lambda_\rho \rangle \frac{1}{\omega - E_I^{(0)} - \omega_\rho + \mathrm{i}\varepsilon} \langle I \mid \langle \boldsymbol{k}_\rho \lambda_\rho \mid (\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{p}) \mid B \rangle \mid 0 \rangle$$

$$\equiv f(\omega) \tag{6.10.15}$$

其费曼图如图 6.13 所示.

图 6.13

按(6.10.14)及(6.10.15)式的精神可以依次讨论(6.10.13)式中所有的高阶项，不过如前所述，用费曼图的办法就可以清楚、直接地得出(6.10.13)式中高阶项的贡献.

(a) 根据(6.10.14)及(6.10.15)式的费曼图结构可以想到，以后高阶图中一定有如图 6.14 所示的 e^4 图以及以后的高阶图.

这些图对 $-\mathrm{i}\langle B,0|\hat{k}(\omega)|B,0\rangle$ 的贡献可以写成级数形式

$$\frac{1}{\omega - E_B^{(0)} + \mathrm{i}\varepsilon} + \frac{1}{\omega - E_B^{(0)} + \mathrm{i}\varepsilon}(f(\omega)+\Lambda)\frac{1}{\omega - E_B^{(0)} + \mathrm{i}\varepsilon} +$$

$$\frac{1}{\omega - E_B^{(0)} + \mathrm{i}\varepsilon}(f(\omega)+\Lambda)\frac{1}{\omega - E_B^{(0)} + \mathrm{i}\varepsilon}(f(\omega)+\Lambda)\frac{1}{\omega - E_B^{(0)} + \mathrm{i}\varepsilon} + \cdots$$

$$= \frac{1}{\omega - E_B^{(0)} - f(\omega) - \Lambda + \mathrm{i}\varepsilon} \tag{6.10.16}$$

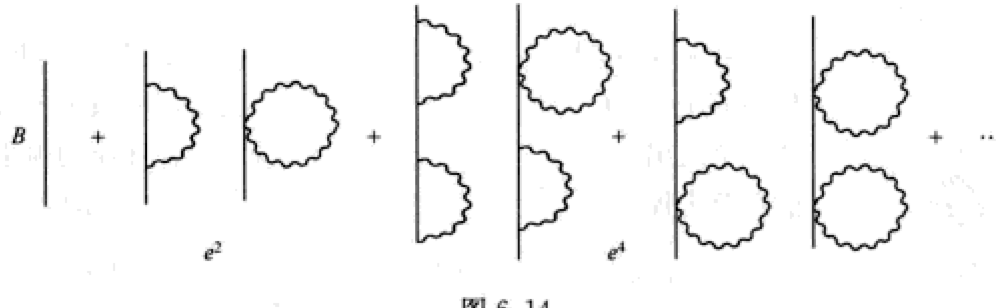


图 6.14

(b) 能否说(6.10.16)式就是对传播子$-\mathrm{i}\langle 0|\langle B|\hat{k}(\omega)|B\rangle|0\rangle$的所有贡献?不是,因为它还没有包括如图 6.15 所示这种类型的图的贡献.

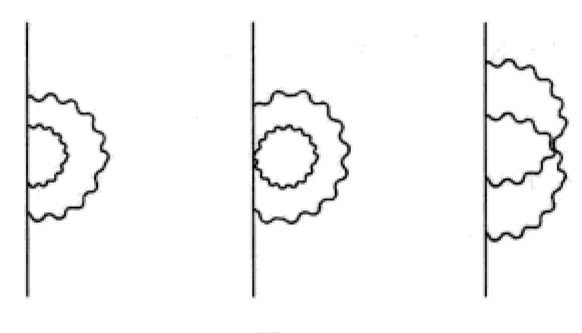


图 6.15

考虑到其他各种图的贡献 $g(\omega), h(\omega), \cdots$后,应当在(6.10.16)式中把 $f(\omega)+\Lambda$ 改写为

$$f(\omega)+\Lambda \rightarrow f(\omega)+\Lambda+g(\omega)+h(\omega)+\cdots=\Phi(\omega) \qquad (6.10.17)$$

(c) 这样一来在考虑了所有图的贡献后,传播子可写成

$$-\mathrm{i}\langle B,0 \mid \hat{k}(\omega) \mid B,0\rangle=\frac{1}{\omega-E_B^{(0)}-\Phi(\omega)+\mathrm{i}\epsilon} \qquad (6.10.18)$$

在只考虑 $\Phi(\omega)$的 e^2 阶近似时有

$$\Phi(\omega) \approx f(\omega)+\Lambda \qquad (6.10.19)$$

有了以上的准备,现在可以回头来讨论共振散射的问题.当把高阶项考虑进去后,发散的问题也就迎刃而解了.为简单记,在计算高阶贡献时只取(6.10.16)式,因此(6.10.11a)式中的 F 应改成

$$F(\omega)=\frac{\langle A,\boldsymbol{k}_f\hat{\varepsilon}_f \mid \hat{V} \mid B,0\rangle\langle B,0 \mid \hat{V} \mid A,\hat{k}_i\hat{\varepsilon}_i\rangle}{E_A^{(0)}+\omega-E_B^{(0)}-f(\omega)-\Lambda+\mathrm{i}\epsilon} \qquad (6.10.20)$$

在共振的情形下,微分散射截面(6.10.11b)式如只考虑右方的第二个求和中的$|I\rangle=|B,0\rangle$项时,即得

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \cong \frac{{r_0}^2}{m^2}\left|\frac{\hat{\varepsilon}_f^* \cdot \boldsymbol{p}_{AB}\hat{\varepsilon}_i \cdot \boldsymbol{p}_{BA}}{\omega_i-(E_B^{(0)}-E_A^{(0)})-f(E_i)-\Lambda+\mathrm{i}\epsilon}\right|^2 \qquad (6.10.21)$$

它已不再发散.

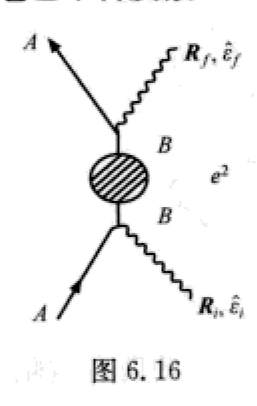


图 6.16

在解决了共振的发散问题后，现在再来看近共振时的 $F^{(2)}(E_i)=f(E_i)$，这时就不能像前面讨论时那样只考虑共振时那一个突出的项了，因为当它不再发散时，所有其他的项也就不能随意去掉了，故其费曼图如图 6.16 所示，即 $f(E_i)$应表示为

$$f(E_i)=\sum_{I,\rho}\frac{\langle B,0\mid\hat{V}\mid I,\rho\rangle\langle I,\rho\mid\hat{V}\mid B,0\rangle}{E_A^{(0)}+\omega_i-E_I^{(0)}-\omega_\rho+\mathrm{i}\varepsilon}\approx\sum_{I,\rho}\frac{\langle B,0\mid\hat{V}\mid I,\rho\rangle\langle I,\rho\mid\hat{V}\mid B,0\rangle}{E_B^{(0)}-E_I^{(0)}-\omega_\rho+\mathrm{i}\varepsilon}\tag{6.10.22}$$

后一近似等式用到了近共振时 $E_B^{(0)}\approx E_A^{(0)}+\omega_i$. 再利用

$$\frac{1}{x+\mathrm{i}\varepsilon}=p\,\frac{1}{x}-\mathrm{i}\pi\delta(x)$$

Im 公式(6.10.22)可表示成

$$f(E_i)\approx\sum_{I,\rho}\mid\langle I,\rho\mid\hat{V}\mid B,0\rangle\mid^2\left(P\frac{1}{E_B^{(0)}-E_I^{(0)}-\omega_\rho}-\mathrm{i}\pi\delta(E_B^{(0)}-E_I^{(0)}-\omega_\rho)\right)\tag{6.10.23}$$

可知

$$\mathrm{Re}\ f(E_i)=P\sum_{i,\rho}\frac{\mid\langle I,\rho\mid\hat{V}\mid B,0\rangle\mid^2}{E_B^{(0)}-E_I^{(0)}-\omega_\rho}$$

$$\mathrm{Im}f(E_i)=-\pi\sum_{I,\rho}\mid\langle I,\rho\mid\hat{V}\mid B,0\rangle\mid^2\delta(E_B^{(0)}-E_I^{(0)}-\omega_\rho)$$

从(6.10.21)式知$|B\rangle$态的能级扰动就是

$$\Delta E_B=\mathrm{Re}f(E_i)+\Lambda$$

至于 $\mathrm{Im}f(E_i)$的意义，比较(6.9.27)式可看出它与$|B,0\rangle$态的衰变几率 Γ_B 有以下的关系

$$\mathrm{Im}f(E_i)=-\frac{1}{2}\Gamma_B\tag{6.10.24}$$

至此，我们可以看到用费曼图的方法同样得出了激发态的能级移动和衰变几率(或寿命). 不过从讨论中可以看出，费曼图方法不仅是一个系统的方法，它也没有 Wigner-Weisskopf 方法里那些不尽合理的近似假定和不自洽之处. 除此之外，在其中还能全面地讨论高阶修正，这在 Wigner-Weisskopf 方法中也是无法做到的.

6.10.3 谱线形状

现在用费曼图方法来讨论谱线形状. 有了以上的准备，很容易得到系统在初始

时刻($t=0$)时居于$|B,0\rangle$态演化到 t 时刻仍居于$|B,0\rangle$的几率幅为

$$\begin{aligned}\langle B,0 \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \mid B,0\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\langle B,0 \mid \hat{k}(\omega) \mid B,0\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\frac{\mathrm{i}}{\omega - E_B^{(0)} - \Lambda - f(\omega) + \mathrm{i}\varepsilon}\end{aligned} \tag{6.10.25}$$

图 6.17

其费曼图如图 6.17 所示，上述积分中贡献最显著的应来自 $\omega \approx E_B^{(0)}$ 附近，所以可近似地将分母中的 $\Lambda + f(\omega)$取作

$$\Lambda + f(\omega) \approx \Lambda + f(E_B^{(0)}) = \Delta E_B - \mathrm{i}\,\frac{1}{2}\Gamma_B \tag{6.10.26}$$

代入(6.10.25)中后，它的分母就是一个单极点的形式，利用图 4.2 形式的积分环路(见图 6.18)立即可得

$$\langle B,0 \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \mid B,0\rangle = \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\left(-2\pi\mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_B^{(0)}+\Delta E_B)t - \frac{1}{2}\Gamma_B t}\right) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_B)t}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\Gamma_B t} \tag{6.10.27}$$

图 6.18

由上式直接可得在 t 时刻仍在$|B,0\rangle$态的几率$p_0(t)$为

$$p_0(t) = |\langle B,0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht} \mid B,0\rangle|^2 = \mathrm{e}^{-\Gamma_B t} \equiv \mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau_B}} \tag{6.10.28}$$

其中

$$\tau_B = \frac{1}{\Gamma_B} \tag{6.10.29}$$

上面的结果告诉我们用费曼图方法同样得到了激发态的指数衰减规律. 现在再来看由激发态$|B\rangle$发射一个光子向基态$|A\rangle$的跃迁，如果只考虑最低级近似，则如图 6.19 所示，但如把高阶修正考虑进来后，裸传播子都应改成物理的传播子，则真实的过程应如图6.20 所示.

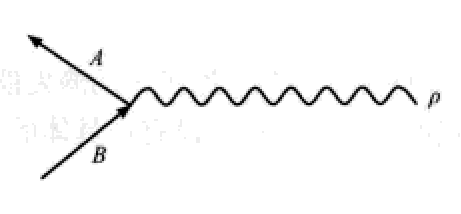


图 6.19

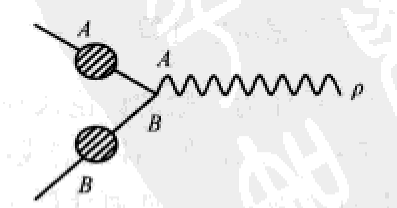


图 6.20

所以，由$|B,0\rangle$到$|A,\rho\rangle$的跃迁的几率幅为

$$\langle A,\rho \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \mid B,0\rangle \cong \mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\frac{1}{\omega - E_A^{(0)} - \omega_\rho - \Lambda - f_A(\omega) + \mathrm{i}\varepsilon}$$

$$\cdot \langle A,\rho \mid \hat{V} \mid B,0\rangle \frac{1}{\omega - E_B^{(0)} - f_B(\omega) - \Lambda + \mathrm{i}\epsilon} \quad (6.10.30)$$

对于上式中第一个物理传播子的分母中的 $f_A(\omega)$和前面的讨论一样它在 $\omega \approx E_A^{(0)} + \omega_\rho$ 附近对(6.10.30)式的积分才有显著的贡献,因此按同样的精神可将 $f_A(\omega)$写作

$$f_A(\omega) = \sum_{I,\sigma} \frac{\langle A,\rho \mid \hat{V} \mid I,\rho,\sigma\rangle\langle I,\rho,\sigma \mid \hat{V} \mid A,\rho\rangle}{\omega - E_I - \omega_\rho - \omega_\sigma + \mathrm{i}\epsilon}$$

$$\approx \sum_{I,\sigma} \frac{\langle A,\rho \mid \hat{V} \mid I,\rho,\sigma\rangle\langle I,\rho,\sigma \mid \hat{V} \mid A,\rho\rangle}{E_A - E_I - \omega_\sigma + \mathrm{i}\epsilon} = f_A(E_A + \omega_\rho) \quad (6.10.31)$$

不过,因为基态是稳定的,不会有衰变,所以它只会有纯粹的能移

$$\Lambda + f_A(\omega) \approx \Delta E_A \quad (6.10.32)$$

最后在写出从初始状态$|B,0\rangle$到 t 时刻的基态$|A,\rho\rangle$的跃迁几率幅时,利用含下大半圆的积分回路,可将跃迁几率幅表为

$$\langle A,\rho \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \mid B,0\rangle = \frac{\langle A,\rho \mid \hat{V} \mid B,0\rangle}{\omega_\rho - (E_B^{(0)} + \Delta E_B - E_A^{(0)} - \Delta E_A) + \mathrm{i}\frac{\Gamma_B}{2}} \cdot \left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_A^{(0)} + \Delta E_A + \omega_\rho)t} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_B^{(0)} + \Delta E_B)t}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\Gamma_B t}\right) \quad (6.10.33)$$

再由$|\langle A,\rho|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}|B,0\rangle|^2$ 可以得到 t 时刻发射出频率为 ω_ρ 的光子的几率,并由此得出按不同频率 ω_ρ 分布的谱线形状.

6.11 能　移

6.11.1 谱线宽度的计算

在上节里作为一般的讨论谈到,由于与电磁场的耦合,原子中的激发能级会衰变,使得能级产生移动并且使谱线产生了宽度.不过,在那里没有作具体的计算,这一节里将仔细地去讨论如何计算这个问题.

在上节里已给出能移展开到二阶的一般公式

$$\Delta E = \Lambda + P\sum_{I,\rho} \frac{|\langle I,\rho \mid \hat{V} \mid B,0\rangle|^2}{E_B^{(0)} - E_I^{(0)} - \omega_\rho} \quad (6.11.1)$$

由于 Λ 是一常量,所以可用“选择能量零点”的办法而去掉,(6.11.1)式中的第二项中的分子是 $\hat{V}$ 在$|B\rangle$态与中间态间的矩阵元.前面指出,中间态$|I,\rho\rangle$是含

一个光子的中间态，所以在 $\hat{V}$ 中起作用的只是其中的 $\hat{V}_1=-\frac{e}{m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}$ 那一部分. $\omega_\rho=k$，因此有

$$\begin{aligned}
&\langle I,\rho \mid \hat{V} \mid B,0\rangle \\
&=\left\langle I,\rho\right|\left(-\frac{e}{m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}\right)\left|B,0\right\rangle \\
&=-\frac{e}{m}\langle I,\boldsymbol{k},\hat{\varepsilon}_{k\lambda} \mid \sum_{k',\lambda'}\frac{1}{\sqrt{2k'}}(a_{k'\lambda'}\hat{\varepsilon}_{k'\lambda'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}+a^{+}_{k'\lambda'}\hat{\varepsilon}_{k'\lambda'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}})\cdot\boldsymbol{p} \mid B,0\rangle \\
&=-\frac{e}{m}\langle \boldsymbol{k},\hat{\varepsilon}_{k\lambda} \mid \sum_{k',\lambda'}\frac{1}{\sqrt{2k'}}a^{+}_{k'\lambda'}\hat{\varepsilon}_{k'\lambda'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}} \mid 0\rangle\langle I \mid \boldsymbol{p} \mid B\rangle \\
&=-\frac{e}{m}\frac{1}{\sqrt{2k}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{\varepsilon}_{k\lambda}\,(\boldsymbol{p})_{IB}\approx-\frac{e}{m}\frac{1}{\sqrt{2k}}\hat{\varepsilon}_{k\lambda}\,(\boldsymbol{p})_{IB}
\end{aligned}\tag{6.11.2}$$

上式的最后一个等式用到了 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\approx1$ 的偶极近似. 将(6.11.2)式代入(6.11.1)式时还将应用极化矢量的公式

$$\sum_{\lambda}(\hat{\varepsilon}^{*}_{k\lambda})_i\,(\hat{\varepsilon}_{k\lambda})_j=\delta_{ij}-\hat{k}_i\hat{k}_j$$

得到

$$\sum_{\lambda}\mid\hat{\varepsilon}_{k,\lambda}\cdot\boldsymbol{p}_{IB}\mid^2=\boldsymbol{p}_{BI}\cdot\boldsymbol{p}_{IB}-\boldsymbol{p}_{BI}\cdot\hat{k}\boldsymbol{p}_{IB}\cdot\hat{k}$$

于是有

$$\begin{aligned}
\Delta E_B&=\sum_I\int\frac{k^2\mathrm{d}k}{(2\pi)^3}\mathrm{d}\Omega_k\cdot\frac{1}{2k}\sum_{\lambda}\left(\frac{e}{m}\right)^2\frac{\mid\hat{\varepsilon}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{p}_{IB}\mid^2}{E_B^{(0)}-E_I^{(0)}-k} \\
&=\sum_I\int\frac{k\mathrm{d}k}{(2\pi)^3}\mathrm{d}\Omega_k\,\frac{e^2}{2m^2}\,\frac{\boldsymbol{p}_{BI}\cdot\boldsymbol{p}_{IB}-\boldsymbol{p}_{BI}\cdot\hat{k}\boldsymbol{p}_{IB}\cdot\hat{k}}{E_B^{(0)}-E_I^{(0)}-k} \\
&=\sum_I\int\frac{k\mathrm{d}k}{(2\pi)^3}\,\frac{e^2}{2m^2}\cdot4\pi\,\frac{2}{3}\,\frac{\mid\boldsymbol{p}_{BI}\mid^2}{E_B^{(0)}-E_I^{(0)}-k} \\
&=-\frac{2}{3\pi}\frac{\alpha}{m^2}\int_0^{\infty}k\mathrm{d}k\sum_I\frac{\mid\boldsymbol{p}_{BI}\mid^2}{k-E_B^{(0)}+E_I^{(0)}}
\end{aligned}\tag{6.11.3}$$

在上式的导出过程中的第三、第四等式的得来是基于以下的一些考虑：我们总可以将 Z 轴选在 $\boldsymbol{p}_{BI}$ 的方向，即

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{p}_{BI}&=(0,0,p_{BI}) \\
\boldsymbol{p}_{IB}&=(0,0,p_{BI})
\end{aligned}$$

同时，在球坐标中，$\hat{k}$，$\hat{\varepsilon}^{(1)}$，$\hat{\varepsilon}^{(2)}$ 可表示成

$$\begin{aligned}
\hat{k}&=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta) \\
\hat{\varepsilon}^{(1)}&=(\sin\varphi,-\cos\varphi,0)
\end{aligned}$$

$$\hat{\varepsilon}^{(2)} = (\cos\theta\cos\varphi, \cos\theta\sin\varphi, -\sin\theta)$$

因此有

$$\boldsymbol{p}_{BI}\cdot\boldsymbol{p}_{IB} - (\boldsymbol{p}_{BI}\cdot\hat{k})(\boldsymbol{p}_{IB}\cdot\hat{k}) = |\boldsymbol{p}_{BI}|^2(1-\cos^2\theta)$$

代入(6.11.3)式的第二等式后面的表示中，再作角度部分的积分

$$\int \mathrm{d}\Omega_k\,|\boldsymbol{p}_{BI}|^2(1-\cos^2\theta) = \int |\boldsymbol{p}_{BI}|^2\sin\theta\mathrm{d}\varphi(1-\cos^2\theta) = |\boldsymbol{p}_{BI}|^2\,\frac{2}{3}\cdot 4\pi$$

6.11.2 发散困难的解决方案

看一下(6.11.3)式中最后表达式里对 k 的积分，分子、分母都含有 k，因此它是一个线性发散的积分，显然直接将(6.11.3)式解释为原子中电子激发态的能移是不行的. Kramers 考虑到这里面可能是一种固有的理论框架带来的发散性，因为当我们回头去看自由电子时，发现只要同样去考虑它和电磁场的耦合，它也会有能移. 从物理上讲，自由电子是不应该有能移的，所以这种表观上的能移应该从物理上给以合理的解释，并由此去解决原子中电子能移的发散问题. 为此，我们要先讨论自由电子与电磁场的作用.

自由电子的能量本征态是平面波，也是动量标符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的本征态，即

$$\hat{\boldsymbol{p}}\,|B\rangle = \hat{\boldsymbol{p}}\,|\boldsymbol{p}\rangle = \boldsymbol{p}\,|\boldsymbol{p}\rangle = \boldsymbol{p}\,|B\rangle$$

故

$$\boldsymbol{p}_{BI} = \langle B|\hat{\boldsymbol{p}}|I\rangle = \boldsymbol{p}\langle B|I\rangle = \boldsymbol{p}\delta_{BI} \tag{6.11.4}$$

因此考虑自由电子与电磁场的耦合时，其“能移 ΔE_p”按(6.11.3)式为

$$\begin{aligned}\Delta E_p &= -\frac{2}{3\pi}\frac{\alpha}{m^2}\int_0^\infty k\mathrm{d}k\sum_I\frac{|\boldsymbol{p}_{BI}|^2}{k-E_B^{(0)}+E_I^{(0)}}\\ &= -\frac{2}{3\pi}\frac{\alpha}{m^2}\int_0^\infty k\mathrm{d}k\sum_I\frac{p^2\delta_{BI}}{k-E_B^{(0)}+E_I^{(0)}}\\ &= -\frac{2}{3\pi}\frac{\alpha}{m^2}\int_0^\infty k\mathrm{d}k\,\frac{p^2}{k}\\ &= -\frac{2}{3\pi}\frac{\alpha}{m^2}p^2\int_0^\infty \mathrm{d}k\end{aligned} \tag{6.11.5}$$

从上式立即看出，在自由电子的情况下，不仅有能移而且能移也是线性发散的，我们可能会想似乎可以直接将(6.11.3)式减去(6.11.5)式来得到原子中电子能级的物理能移. 不过，问题并不是这样简单，因为其中还需要更细微一点的物理分析，需要细微一点分析的原因是因为以上讨论的量子理论都是在非相对论的基础上进行的，因此它只适用于 $k\sim m$ 的范围，超过这一范围需用相对论的量子理论来讨论. 当考虑了相对论的效应后，包括(6.11.3)式在内的线性发散都会成为对数发散，所以在(6.11.5)式中只需将上限取到 m 即可. 因此，只在非相对论量子理论

框架下计算 ΔE_p 应为

$$\Delta E_p = -\frac{2}{3\pi}\frac{\alpha}{m^2}p^2\int_0^m \mathrm{d}k = -\frac{2}{3\pi}\frac{\alpha}{m}p^2$$
$$= -\frac{4}{3\pi}\alpha\frac{p^2}{2m} = -\frac{4}{3\pi}\alpha\cdot E_p$$

得到相对能移为

$$\frac{\Delta E_p}{E_p} \approx -\frac{4}{3\pi}\alpha \tag{6.11.6}$$

那么怎样来解释自由电子也会有能移呢？可以解释为自由电子由于电磁场的存在它的质量增加了 δm，因而产生了能移，即

$$\Delta E_p = \frac{p^2}{2(m+\delta m)} - \frac{p}{2m} \sim -\frac{p^2}{2m^2}\delta m \tag{6.11.7}$$

上式中近似的得来是因为 $\delta m \ll m$，将这一近似表示与(6.11.6)式比较，知

$$\delta m = \frac{4\alpha}{3\pi}\int_0^m \mathrm{d}k \tag{6.11.8}$$

这样的处理在物理上称作质量的重整化，即物理上观察到的是 $m_{\exp}$

$$m_{\exp} = m + \delta m \tag{6.11.9}$$

而不是 m. 换句话说，m 只有纯理论的意义. 因此为了与实验比较，原始的原子中电子与电磁场的哈密顿量应改用 $m_{\exp}$来表示

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + e\Phi(\boldsymbol{r}) + \hat{H}_{\mathrm{rad}} + \hat{V} \\ &= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_{\exp}} + e\Phi(\boldsymbol{r}) + \hat{H}_{\mathrm{rad}} + \hat{V} + \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{\boldsymbol{p}^2}{2(m+\delta m)}\right) \\ &\equiv \hat{H}'_0 + \hat{V}'\end{aligned} \tag{6.11.10}$$

其中

$$\hat{V}' = \hat{V} + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m^2}\delta m \equiv \hat{V}_1 + \hat{V}_2 \tag{6.11.11}$$

现在需要着重阐明(6.11.10)式的意义.(a)(6.11.10)式第一行表明理论上考虑的是电子的裸质量，故有 $\hat{H}_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + e\Phi(\boldsymbol{r}) + \hat{H}_{\mathrm{rad}}$，电子与电磁场之间的相互作用是 $\hat{V}$.(b)(6.11.10)式第二行告诉我们实验上观察到的电子质量不是裸质量 m，而是 $m_{\exp} = m + \delta m$；实验上观察到的不包括相互作用的哈密顿量部分不再是 $\hat{H}_0$ 而是 $\hat{H}'_0$，而这时的相互作用也不再是原来的 $\hat{V}(\hat{V}_1)$ 而是 $\hat{V}_1 + \hat{V}_2$ 了.

因此，考虑了(6.11.11)形式的 $\hat{V}'$后的能移便有了两部分的贡献，第一部来自 $\hat{V}_1(=\hat{V})$，其结果就是前面讨论过的

$$\Delta E_1 = -\frac{2}{3\pi}\frac{\alpha}{m^2}\int_0^\infty \mathrm{d}kk\sum_I \frac{\langle B \mid \boldsymbol{p} \mid I\rangle\langle I \mid \boldsymbol{p} \mid B\rangle}{k+E_I^{(0)}-E_B^{(0)}} \tag{6.11.12}$$

来自 $\hat{V}_2=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m^2}\delta m$ 的能移为

$$\begin{aligned}\Delta E_2 &= \frac{1}{2m^2}\delta m\langle B \mid \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p} \mid B\rangle \\ &= \frac{4\alpha}{3\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}k\,\frac{1}{2m^2}\sum_I\langle B \mid \boldsymbol{p} \mid I\rangle\langle I \mid \boldsymbol{p} \mid B\rangle \\ &= \frac{2\alpha}{3\pi m^2}\int_0^\infty \mathrm{d}k\sum_I(k+E_I^{(0)}-E_B^{(0)})\,\frac{\langle B \mid \boldsymbol{p} \mid I\rangle\langle I \mid \boldsymbol{p} \mid B\rangle}{k+E_I^{(0)}-E_B^{(0)}}\end{aligned} \tag{6.11.13}$$

现在将(6.11.12)与(6.11.13)式相加，得到能移 ΔE_{tot} 为

$$\begin{aligned}\Delta E_{\text{tot}} &= \Delta E_1 + \Delta E_2 \\ &= \frac{2\alpha}{3\pi m^2}\int_0^\infty \mathrm{d}k\sum_I \frac{(E_I^{(0)}-E_B^{(0)})}{k+E_I^{(0)}-E_B^{(0)}}\end{aligned} \tag{6.11.14}$$

经过在对自由电子的考虑中引入质量重整化和修正了相互作用，增加了对能移的贡献. 得到的结论是，由于(6.11.14)式中只有分母中才含 k，能移已由原来的线性发散降低成对数发散了.

非相对论量子理论只适用于低 k 范围，发散来自高 k 的部分，正确的理论应该是应用相对论性量子理论得到的. 虽然这里不去讨论它，但是需要指出的是，同样的问题用相对论量子理论去处理时其发散程度总是比非相对论量子理论得出的发散程度低，即如用非相对论量子理论得出是线性发散，则用相对论量子理论处理时就只是对数发散；如用前者处理时是对数发散，则用后者处理时就不再发散. 因此，当我们在非相对论量子理论框架下得出(6.11.14)式的对数发散后，我们可以宣告发散问题已经得到解决. 或者说虽然这里不去讨论相对论量子理论怎样计算能移，但我们可以把它等价于在(6.11.14)式中对 k 的积分上限不取作无穷而以一个有限的上限代替，来体现出正确的相对论效应.

因为是讨论能移，只需考虑(6.11.14)式中的实部，即其中的主值积分. 为此先对如下的主值积分进行讨论.

当 $a>0$ 时

$$\begin{aligned}P\int_0^k \frac{\mathrm{d}k}{k-a} &= \int_0^{a-\varepsilon}\frac{\mathrm{d}k}{k-a} + \int_{a+\varepsilon}^k \frac{\mathrm{d}k}{k-a} \\ &= [\ln(k-a)]_0^{a-\varepsilon} + [\ln(k-a)]_{a+\varepsilon}^k \\ &= \ln\frac{\varepsilon}{a} + \ln\frac{k-a}{\varepsilon} = \ln\frac{k-a}{a}\end{aligned} \tag{6.11.15}$$

当 $a<0$ 时，这时实轴上已无极点，所以主值积分与普通积分一样.

$$p\int_0^k \frac{\mathrm{d}k}{k-a} = \int_0^k \frac{\mathrm{d}k}{k+|a|} = [\ln(k+|a|)]_0^k = \ln\frac{k+|a|}{|a|} \tag{6.11.16}$$

如果 $k\gg|a|$，则上式可以近似地合并为

$$P\int_0^k \frac{\mathrm{d}k}{k-a}\simeq \ln\frac{k}{|a|} \tag{6.11.17}$$

由于(6.11.14)式中的上限 k 正好符合 $k\gg|E_I^{(0)}-E_B^{(0)}|$ 的条件，所以有

$$\Delta E=\frac{2\alpha}{3\pi m^2}\sum_I|\langle I|\boldsymbol{p}|B\rangle|^2(E_I^{(0)}-E_B^{(0)})\ln\frac{k}{|E_I^{(0)}-E_B^{(0)}|} \tag{6.11.18}$$

对数函数 $\ln\dfrac{k}{|E_I^{(0)}-E_B^{(0)}|}$ 与 $(E_I^{(0)}-E_B^{(0)})$ 相比变化率缓慢得多，所以可应用类似于积分中值定理的精神将它改写为

$$\Delta E=\frac{2\alpha}{3\pi m^2}\left(\ln\frac{k}{|E_I^{(0)}-E_B^{(0)}|}\right)_{AV}\sum_I|\langle I|\boldsymbol{p}|B\rangle|^2(E_I^{(0)}-E_B^{(0)}) \tag{6.11.19}$$

即在上式中将缓变的 $\ln\dfrac{k}{|E_I^{(0)}-E_B^{(0)}|}$ 用其平均值代替而提出求和号，这时(6.11.19)式中的求和号以后的表达式可以改写为

$$\begin{aligned}&\sum_I(E_I^{(0)}-E_B^{(0)})\langle B|\boldsymbol{p}|I\rangle\langle I|\boldsymbol{p}|B\rangle\\&=\sum_I\langle B|\boldsymbol{p}|I\rangle\langle I|(E_I^{(0)}-E_B^{(0)})\boldsymbol{p}|B\rangle\\&=\sum_I\langle B|\boldsymbol{p}|I\rangle\langle I|[\hat{H}_{\text{atom}},\boldsymbol{p}]|B\rangle\\&=\langle B|\boldsymbol{p}[\hat{H}_{\text{atom}},\boldsymbol{p}]|B\rangle\end{aligned} \tag{6.11.20}$$

从上式看出要再进一步讨论就需指明具体原子的 $\hat{H}_{\text{atom}}$ 了.

现在以最简单的单电子原子——氢原子为例.

$$\hat{H}_{\text{atom}}=\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2-\frac{\alpha}{r} \tag{6.11.21}$$

注意上式中的 m 应理解为 m_{exp}，由于以后都是谈论 m_{exp}，所以下标就不再写了. 由(6.11.21)式可得

$$[\hat{H}_{\text{atom}},\boldsymbol{p}]=\left[\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2-\frac{\alpha}{r},\boldsymbol{p}\right]=\left[-\frac{\alpha}{r},\boldsymbol{p}\right]=\left[-\frac{\alpha}{r},-\mathrm{i}\nabla\right]=-\mathrm{i}\nabla\frac{\alpha}{r} \tag{6.11.22}$$

得出

$$\langle B|\boldsymbol{p}[\hat{H}_{\text{atom}},\boldsymbol{p}]|B\rangle=-\int\mathrm{d}^3\gamma\psi_B^*(\boldsymbol{r})\nabla\cdot\left(\psi_B(\boldsymbol{r})\nabla\frac{\alpha}{r}\right) \tag{6.11.23}$$

因为 $\boldsymbol{p}, \hat{H}_{\text{atom}}$ 都是厄米特算符，它们在 $|B\rangle$ 中取的期待值一定是实数，所以可将上式中的任何实的量 A 表示为 $A=\frac{1}{2}A+\frac{1}{2}A^*$ 从而将上式改成

$$\begin{aligned}
&\langle B \mid \boldsymbol{p}[\hat{H}_{\text{atom}}, \boldsymbol{p}] \mid B\rangle \\
&=-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3 r \psi_{B(r)}^* \nabla \cdot \left(\psi_B(\boldsymbol{r}) \nabla \frac{\alpha}{r}\right)-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3 r \psi_B(\boldsymbol{r}) \nabla \cdot \left(\psi_B^*(\boldsymbol{r}) \nabla \frac{\alpha}{r}\right) \\
&=-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3 r \psi_B^*(\boldsymbol{r}) \nabla \cdot \left(\psi_B(\boldsymbol{r}) \nabla \frac{\alpha}{\gamma}\right)-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3 r \nabla \cdot \left(|\psi_B(\boldsymbol{r})|^2 \nabla \frac{\alpha}{r}\right. \\
&\quad +\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3 r \psi_B^*(\boldsymbol{r})(\nabla \psi_B(\boldsymbol{r})) \cdot \nabla \frac{\alpha}{r} \\
&=-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3 r \psi_B^*(\boldsymbol{r})\left[\nabla \cdot \left(\psi_B(\boldsymbol{r}) \nabla \frac{\alpha}{r}\right)\right]-\left(\nabla \psi_B(\boldsymbol{r}) \cdot \nabla \frac{\alpha}{r}\right)\Big] \\
&=-\frac{\alpha}{2}\int \mathrm{d}^3 r \mid \psi_B(\boldsymbol{r}) \mid^2 \nabla^2 \left(\frac{1}{r}\right) \\
&=-\frac{\alpha}{2}\int \mathrm{d}^3 r \mid \psi_B(\boldsymbol{r}) \mid^2 (-4\pi\delta^3(\boldsymbol{r})) \\
&= 2\pi\alpha \mid \psi_B(0) \mid^2
\end{aligned} \tag{6.11.24}$$

在上式的推导过程中，第二等式右侧的第二项是三维散度的全空间积分故为零，倒数的第二等式应用了 $\nabla^2\left(\frac{1}{r}\right)=-4\pi\delta^3(\boldsymbol{r})$ 的关系式. 由(6.11.19)，(6.11.20)及(6.11.21)式可知，一个能态 $|B\rangle$ 的能移和这个态在零点处的波函数 $\psi_B(0)$ 有关，而要零点波函数的值不为零，只有 S 波才具有这个性质. 由氢原子的能态波函数知

$$|\psi_{nS_{\frac{1}{2}}}(0)|^2=\frac{1}{\pi n^3 a_0^3} \quad (n\text{ 为主量子数}) \tag{6.11.25}$$

$$a_0=\frac{1}{\alpha m} \tag{6.11.26}$$

这样，由(6.11.19)～(6.11.24)式得

$$\Delta E=\begin{cases}\dfrac{4}{3\pi}\dfrac{\alpha^5 m}{n^3}\ln\dfrac{k}{|E-E_B^{(0)}|_{AV}} & S\text{ 态} \\ 0 & \text{非 } S\text{ 态}\end{cases} \tag{6.11.27}$$

按能移修正后的 S 态的能量算出的氢原子 $2S_{\frac{1}{2}}$ 与 $2P_{\frac{1}{2}}$ 间的跃迁谱线为(MHz)

$$E_{2S_{\frac{1}{2}}}-E_{2P_{\frac{1}{2}}}\approx 1\,048\ \text{MHz}$$

实验值为 1 057±0.1 MHz.

第7章　含时哈密顿量问题及绝热近似

量子理论讨论物理系统随时间演化问题的基本出发点是薛定谔方程. 这是用物理系统的态矢随时间变化的薛定谔图像描述的,与之等价的描述是态矢不变、力学量随时间改变的海森堡图像. 在前面几章里几乎都只是讨论哈密顿量不显含时间的情形. 对于与时间有关的外势作用的情形,即哈密顿量显含时间的物理系统的演化问题,虽然原则上也可从薛定谔方程出发,但其繁复的程度比起不显含时间的哈密顿量会大许多. 由于含时哈密顿量问题在近来的研究热点领域中越来越受到关注,所以应当用一定的篇幅去加以讨论.

本章对含时哈密顿量问题将在一定条件下用一种非微扰近似的方法——绝热近似方法——来处理. 此外也将介绍严格的 Lewis 方法以及时空变换方法. 我们会看到后面的两种严格方法总要联系到一个非线性方程的求解问题,因此一般情况下是不容易求出解析解的.

7.1　绝热近似

7.1.1　绝热近似的含义

考虑如下的含时哈密顿量 $\hat{H}(t)$

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t) \tag{7.1.1}$$

对于含时的哈密顿量可以定义瞬时本征态 $|\psi_n(t)\rangle$ 及瞬时本征值 $E_n(t)$,它们满足如下的瞬时本征方程

$$\hat{H}(t) \mid \psi_n(t)\rangle = E_n(t) \mid \psi_n(t)\rangle \tag{7.1.2}$$

系统的任何态矢显然总可以按瞬时本征态展开

$$\mid \psi(t)\rangle = \sum_n b_n(t) \mid \psi_n(t)\rangle \tag{7.1.3}$$

将它代入薛定谔方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) \mid \psi(t)\rangle \tag{7.1.4}$$

给出

$$\sum_n (\mathrm{i}\dot{b}_n(t) \mid \psi_n(t)\rangle + \mathrm{i}b_n(t) \mid \dot{\psi}_n(t)\rangle = \sum_n b_n(t)E_n(t) \mid \psi_n(t)\rangle \tag{7.1.5}$$

定义

$$b_n(t) = C_n(t)\exp\left(-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t} \mathrm{d}t' E_n(t')\right) \tag{7.1.6}$$

将(7.1.6)式代入(7.1.5)式，消去两端相同的项，得

$$\begin{aligned}&\sum_m \dot{C}_m(t)\exp\left(-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t}\mathrm{d}t' E_m(t')\right)\mid\psi_m(t)\rangle\\&= -\sum_m C_m(t)\exp\left(-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t}\mathrm{d}t' E_m(t')\right)\mid\dot{\psi}_m(t)\rangle\end{aligned}$$

对上式两方左乘$\langle\psi_n(t)|$，并利用定态的正交性，即得

$$\dot{C}_n(t) = -\sum_m C_m(t)\exp\left(-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t}\mathrm{d}t'[E_m(t') - E_n(t')]\right)\langle\psi_n(t)\mid\dot{\psi}_m(t)\rangle \tag{7.1.7}$$

另一方面由归一条件

$$\langle\psi_n(t)\mid\psi_n(t)\rangle = 1 \tag{7.1.8}$$

将(7.1.8)式两端对t微商，得

$$\begin{aligned}0 &= \langle\dot{\psi}_n(t)\mid\psi_n(t)\rangle + \langle\psi_n(t)\mid\dot{\psi}_n(t)\rangle\\&= 2\mathrm{Re}\,\langle\psi_n(t)\mid\dot{\psi}_n(t)\rangle\end{aligned}$$

由于$\langle\psi_n(t)|\psi_n(t)\rangle$总是实的，它们的微商也是实的，即$\langle\psi_n(t)|\dot{\psi}_n(t)\rangle$只能为实. 所以上式等同于

$$\langle\psi_n(t)\mid\dot{\psi}_n(t)\rangle = 0 \tag{7.1.9}$$

于是(7.1.7)式成为

$$\dot{C}_n(t) = -\sum_{m\neq n} C_m(t)\exp\left(-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t}\mathrm{d}t'[E_m(t') - E_n(t')]\right)\langle\psi_n(t)\mid\dot{\psi}_m(t)\rangle \tag{7.1.10}$$

将(7.1.2)式的瞬时本征方程对t求微商，得

$$\dot{\hat{H}}_1(t)\mid\psi_m(t)\rangle + \hat{H}(t)\mid\dot{\psi}_m(t)\rangle = \dot{E}_m(t)\mid\psi_m(t)\rangle + E_m(t)\mid\dot{\psi}_m(t)\rangle \tag{7.1.11}$$

将上式两方左乘以$\langle\psi_n(t)|$，$m\neq n$，则有

$$\begin{aligned}&\langle\psi_n(t)\mid\dot{\hat{H}}_1(t)\mid\psi_m(t)\rangle + \langle\psi_n(t)\mid\hat{H}(t)\mid\dot{\psi}_m(t)\rangle\\&= \dot{E}_m(t)\langle\psi_n(t)\mid\psi_m(t)\rangle + E_m(t)\langle\psi_n(t)\mid\dot{\psi}_m(t)\rangle\end{aligned} \tag{7.1.12}$$

因为$m\neq n$，由正交性可知上式右方的第一项为0，而上式左方第二项中有$\langle\psi_n(t)|\hat{H}(t) = E_n(t)\langle\psi_n(t)|$，故上式可化为

$$\langle\psi_n(t)\mid\dot{\psi}_m(t)\rangle = \frac{\langle\psi_n(t)\mid\dot{\hat{H}}_1(t)\mid\psi_m(t)\rangle}{E_m(t) - E_n(t)} \tag{7.1.13}$$

现在将(7.1.13)式代入(7.1.10)式并对两端作对 t 的积分 $\int_{t_i}^{t}\mathrm{d}t'\dot{C}_n(t')=C_n(t)-C_n(t_i)$，于是(7.1.10)式可改写为

$$C_n(t)=C_n(t_i)+\sum_{m\neq n}\int_{t_i}^{t}C_m(t')\mathrm{d}t'\exp\left[-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t'}\mathrm{d}t''(E_m(t'')-E_n(t''))\right]\times\frac{\langle\psi_n(t')\mid\dot{\hat{H}}_1(t')\mid\psi_m(t')\rangle}{E_n(t')-E_m(t')}\tag{7.1.14}$$

由于右端的积分中仍含有未知量 $C_m(t')$，这样的积分方程只好用迭代法求解.

第一次迭代用右方的 $C_n(t_i)$ 代替右方积分中的 $C_m(t')$，第二次迭代时再用第一次迭代得到的 $C_n(t)$ 去代替右方的 $C_m(t')$，如此不断继续下去最后得到如下的展开式

$$C_n(t)=C_n(t_i)+\sum_{m\neq n}C_m(t_i)\int_{t_i}^{t}\mathrm{d}t'\exp\left[-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t'}\mathrm{d}t''(E_m(t'')-E_n(t''))\right]\times\frac{\langle\psi_n(t')\mid\dot{\hat{H}}_1(t')\mid\psi_m(t')\rangle}{E_n(t')-E_m(t')}+\cdots\tag{7.1.15}$$

在(7.1.15)式中没有明显写出正比于 $\left(\frac{\langle\psi_n(t')|\dot{\hat{H}}_1(t')|\psi_m(t')\rangle}{E_n(t')-E_m(t')}\right)^2$ 的第三项和以后的高阶项. 如果在(7.1.15)式中只取前两项作为 $C_n(t)$ 的近似表示，那么这种近似展开在什么条件下是有效的呢？因为从上面的分析看出，后面略去的项是依 $\frac{\langle\psi_n(t')|\dot{\hat{H}}_1(t')|\psi_m(t')\rangle}{E_n(t')-E_m(t')}$ 的幂次变化的，可见这种近似要成立，这个量本身应是一个小量.

如记 $\hat{H}_1(t)$ 的时间尺度为 T，即 $\dot{\hat{H}}_1(t)\sim\frac{1}{T}$，上述量的分母是 $\Delta E\sim E_n(t')-E_m(t')$，因此这个量是小量的条件是

$$\Delta E\cdot T\gg 1\tag{7.1.16}$$

有了以上的分析，现在可以给这种称之为绝热近似的成立条件一个明确的定义，即如要(7.1.15)式的右方只取前两项的绝热近似是一个好的近似，(7.1.16)式的不等式必须成立.

7.1.2　绝热近似下的传播子

重复一下上节的讨论. 含时哈密顿量系统的初始态为 $|\boldsymbol{x}_i,t_i\rangle$，将初始态用瞬时本征态展开

$$|\boldsymbol{x}_i,t_i\rangle=\sum_n b_n(t_i)\,|\psi_n(t_i)\rangle$$

其中

$$b_n(t_i)=\langle\psi_n(t_i)\,|\,\boldsymbol{x}_i,t_i\rangle=\psi_n^*(\boldsymbol{x}_i,t_i)$$

根据(7.1.6)式,在 $t=t_i$ 时

$$C_n(t_i)=b_n(t_i)=\psi_n^*(\boldsymbol{x}_i,t_i)$$

结合(7.1.15)式有

$$\begin{aligned}
b_n(t_f)&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t'E_n(t')}C_n(t_f)\\
&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t'E_n(t')}\Big[C_n(t_i)+\sum_{m\neq n}C_m(t_i)\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t'\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t'}(E_m(t'')-E_n(t''))\mathrm{d}t''}\\
&\quad\cdot\frac{\langle\psi_n(t')\,|\,\dot{H}(t')\,|\,\psi_m(t')\rangle}{E_n(t')-E_m(t')}\Big]\\
&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t'E_n(t')}\psi_n^*(\boldsymbol{x}_i,t_i)+\sum_{m\neq n}\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t}^{t_f}\mathrm{d}t'E_n(t')}\frac{\langle\psi_n(t)\,|\,\dot{H}(t)\,|\,\psi_m(t)\rangle}{E_n(t)-E_m(t)}\\
&\quad\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t}\mathrm{d}t''_m E_m(t'')}\psi_m^*(\boldsymbol{x}_i,t_i)\mathrm{d}t+\cdots
\end{aligned}\tag{7.1.17}$$

注意,第二项中用到了关系

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t'E_n(t')}\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{t_i}^{t}\mathrm{d}t'E_n(t')}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t}^{t_f}\mathrm{d}t'E_n(t')}$$

根据(7.1.17)式可以导出传播子的表达式

$$\begin{aligned}
D_f(\boldsymbol{x}_f,t_f;\boldsymbol{x}_i,t_i)&=\sum_n\psi_n(\boldsymbol{x}_f,t_f)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}tE_n(t)}\psi_n^*(\boldsymbol{x}_i,t_i)\\
&\quad+\sum_n\sum_{m\neq n}\psi_n(\boldsymbol{x}_f,t_f)\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t}^{t_f}\mathrm{d}t'E_n(t')}\frac{\langle\psi_n(t)\,|\,\dot{H}(t)\,|\,\psi_m(t)\rangle}{E_n(t)-E_m(t)}\\
&\quad\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t}\mathrm{d}t''E_m(t'')}\psi_m^*(\boldsymbol{x}_i,t_i)\mathrm{d}t+\cdots
\end{aligned}\tag{7.1.18}$$

现在来详细讨论如何导出上式.

(a) 对于末时刻 t_f 同样有以下关系

$$\psi_n(\boldsymbol{x}_f,t_f)=\langle\boldsymbol{x}_f,t_f\,|\,\psi_n(t_f)\rangle$$

及

$$|\psi(t_f)\rangle=\sum_n b_n(t_f)\,|\psi_n(t_f)\rangle\tag{7.1.19}$$

(b) 将 t_f-t_i 分成 N 段,每段长为 ε

$$\varepsilon=\frac{t_f-t_i}{N}\tag{7.1.20}$$

按传播子的定义

$$
\begin{aligned}
D_f(\boldsymbol{x}_f, t_f; \boldsymbol{x}_i, t_i) &= \langle \boldsymbol{x}_f \mid T\exp\left(-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t\hat{H}(t)\right) \mid \boldsymbol{x}_i \rangle \\
&= \langle \boldsymbol{x}_f \mid \prod_{k=1}^{N} \exp(-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}(k\varepsilon)) \mid \boldsymbol{x}_i \rangle \\
&= \sum_{p,m,\cdots,r} \langle \boldsymbol{x}_f \mid \psi_p(t_f)\rangle\langle\psi_p(t_f) \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}(t_f)} \mid \psi_m(t_i+(N-1)\varepsilon)\rangle \\
&\quad \cdot \langle\psi_m(t_i+(N-1)\varepsilon) \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}(t_i+(N-1)\varepsilon)} \mid \psi_n(t_i+(N-2)\varepsilon)\rangle\cdots \\
&\quad \cdots\langle\psi_s(t_i+\varepsilon) \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}(t_f+\varepsilon)} \mid \psi_n(t_i)\rangle\langle\psi_r(t_i) \mid \boldsymbol{x}_i\rangle
\end{aligned} \tag{7.1.21}
$$

(c) 取出(7.1.21)式中的一个矩阵元来看

$$
\begin{aligned}
A_{mn}^k &\equiv \langle\psi_m(t_i+k\varepsilon) \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}(t_i+k\varepsilon)} \mid \psi_n(t_i+(k-1)\varepsilon)\rangle \\
&= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon E_m(t_i+k\varepsilon)}\langle\psi_m(t_i+k\varepsilon) \mid \psi_n(t_i+(k-1)\varepsilon)\rangle \\
&= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon E_m(t_i+k\varepsilon)}\Big[\delta_{mn} \\
&\quad +\varepsilon\frac{\langle\psi_m(t_i+(k-1)\varepsilon) \mid \dot{\hat{H}}_1(t_i+(k-1)\varepsilon) \mid \psi_n(t_i+(k-1)\varepsilon)\rangle}{E_m(t_i+(k-1)\varepsilon)-E_n(t_i+(k-1)k\varepsilon)} \\
&\quad +o(\varepsilon^2)\Big]
\end{aligned} \tag{7.1.22}
$$

在最后一个等式里用到了如下关系

$$
\frac{1}{\varepsilon}[\langle\psi_m(t_i+k\varepsilon)\mid-\langle\psi_m(t_i+(k-1)\varepsilon)\mid]=\langle\dot{\psi}_m(t_i+(k-1)\varepsilon)\mid
$$

即

$$
\langle\psi_m(t_i+k\varepsilon)\mid=\langle\psi_m(t_i+(k-1)\varepsilon)\mid+\varepsilon\langle\dot{\psi}_m(t_i+(k-1)\varepsilon)\mid
$$

因此有

$$
\begin{aligned}
&\langle\psi_m(t_i+k\varepsilon)\psi_n(t_i+(k-1)\varepsilon)\rangle \\
&=\delta_{mn}+\varepsilon\frac{\psi_m(t_i+(k-1)\varepsilon \mid \dot{\hat{H}}_1(t_i+(k-1)\varepsilon \mid \psi_n(t_i+(k-1)\varepsilon)\rangle}{E_m(t_i+(k-1)\varepsilon)-E_n(t_i+(k-1)\varepsilon)}
\end{aligned}
$$

上式的最后一个等式用到(7.1.13)式.

(d) 将(7.1.21)式中的每一个矩阵元都用(7.1.22)的表示式代入,并只保留到 ε 的项,就得

$$D_f(\boldsymbol{x}_f,t_f;\boldsymbol{x}_i,t_i)=\sum_n\psi_n(\boldsymbol{x}_f;t_f)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\sum\limits_{k=1}^{N}E_n(t_i+k\epsilon)}\psi^*(\boldsymbol{x}_i,t_i)$$
$$+\sum_n\sum_{m\neq n}\sum_{k=1}^{N}\psi_n(\boldsymbol{x}_f,t_f)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\sum\limits_{l=k}^{N}E_n(t_i+l\epsilon)}$$
$$\cdot\epsilon\frac{\langle\psi_n(t_i+k\epsilon\mid\dot{\hat{H}}_1(t_i+k\epsilon)\mid\psi_m(t_i+k\epsilon)\rangle}{E_n(t_i+k\epsilon)-E_m(t_i+\epsilon)}$$
$$\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\sum\limits_{p=1}^{k}E_m(t_i+p\epsilon)}\psi_m(\boldsymbol{x}_i;t_i)+\cdots\tag{7.1.23}$$

令 $N\to\infty$,并将求和变成积分即得(7.1.18)式.

根据得到的(7.1.23)式我们可以对绝热近似的物理含义作一些解释.只取(7.1.23)式右方的第一项并把它和不含时哈密顿量对应的传播子(4.3.4)式作比较即可看出,如将(7.1.23)式右方第一项中的 $E_n(t)$ 只取关于 t 展开的线性项,两者的形式完全一样.换句话说,在绝热近似的零级近似里,只要把不含时哈密顿量系统的传播子表示式指数上的 $E_n\cdot t$ 因子换成含时系统表示中的关于 t 的线性项即可.更高阶近似的意义是对这一指数因子作更进一步的修正.

7.1.3　随时间改变磁场中的自旋$\frac{1}{2}$粒子

为了检验绝热近似的有效性与绝热近似成立条件之间的联系,下面将用一个简单并能严格求解的例子加以说明.

(a) 考虑一个自旋为$\frac{1}{2}$的粒子放置在一个均匀磁场中的动力学问题.这个均匀磁场的指向绕 z 轴以 θ 为夹角按圆频率 ω 转动,因此这一磁场可表示为

$$\boldsymbol{B}(t)=B_0(\sin\theta\cos\omega t\hat{x}+\sin\theta\sin\omega t\hat{y}+\cos\theta\hat{z})\tag{7.1.24}$$

电子在磁场中的哈密顿量为

$$H(t)=-\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}(t)\tag{7.1.25}$$

因此这是一个含时哈密顿量问题.将待求的粒子波函数写成二分量形式

$$\psi(t)=\begin{bmatrix}\varphi_a^{(0)}(t)\\ \varphi_b^{(0)}(t)\end{bmatrix}\tag{7.1.26}$$

代入薛定谔方程中($\hbar=1$),有

$$\mathrm{i}\dot{\psi}(t)=-\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}(t)\psi(t)\tag{7.1.27}$$

上式中的 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}(t)$ 按(7.1.24)式可表示为

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}(t)=B_0\left\{\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\sin\theta\cos\omega t+\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}\sin\theta\sin\omega t+\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\cos\theta\right\}$$

$$= B_0 \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\omega t} \\ \sin\theta\, e^{i\omega t} & -\cos\theta \end{pmatrix} \tag{7.1.28}$$

把(7.1.28)式代入(7.1.27)式，写出上、下两个分量的方程，得

$$\begin{aligned} i\dot{\varphi}_a &= -\mu B_0(\cos\theta\,\varphi_a^{(0)} + \sin\theta\, e^{-i\omega t}\varphi_b^{(0)}) \\ i\dot{\varphi}_b &= -\mu B_0(\sin\theta\, e^{i\omega t}\varphi_a^{(0)} - \cos\theta\,\varphi_b^{(0)}) \end{aligned} \tag{7.1.29}$$

把 $\varphi_a^{(0)}$，$\varphi_b^{(0)}$ 写成

$$\varphi_a^{(0)} = e^{-i\frac{\omega t}{2}}\varphi_a, \quad \varphi_b^{(0)} = e^{i\frac{\omega t}{2}}\varphi_b \tag{7.1.30}$$

然后将(7.1.30)式代入(7.1.29)式，得

$$i\dot{\varphi}_a + \frac{\omega}{2}\varphi_a = -\mu B_0(\varphi_a\cos\theta + \varphi_b\sin\theta) \tag{7.1.31}$$

$$i\dot{\varphi}_b - \frac{\omega}{2}\varphi_b = -\mu B_0(\varphi_a\sin\theta - \varphi_b\cos\theta) \tag{7.1.32}$$

(7.1.31)式两端再对 t 作一次微商，得

$$i\ddot{\varphi}_a + \frac{\omega}{2}\dot{\varphi}_a = -\mu B_0(\dot{\varphi}_a\cos\theta + \dot{\varphi}_b\sin\theta) \tag{7.1.33}$$

将(7.1.31)和(7.1.32)式代入(7.1.33)式后化简，有

$$\ddot{\varphi}_a = -\frac{1}{4}[\omega^2 + 4\omega\mu B_0\cos\theta + 4\,(\mu B_0)^2\cos^2\theta + 4\,(\mu B_0)^2\sin^2\theta]\varphi_a \tag{7.1.34}$$

引入

$$\Omega^2 \equiv (\omega + 2\mu B_0\cos\theta)^2 + 4\,(\mu B_0\sin\theta)^2 \tag{7.1.35}$$

后(7.1.35)式可改写为

$$\ddot{\varphi}_a = -\frac{\Omega^2}{4}\varphi_a \tag{7.1.36}$$

由上式立即得到 φ_a 的普遍解为

$$\varphi_a = c_1 e^{i\frac{\Omega t}{2}} + c_2 e^{-i\frac{\Omega t}{2}} \tag{7.1.37}$$

由(7.1.37)和(7.1.31)式又可得到

$$\varphi_b = \frac{1}{2\mu B_0\sin\theta}[(\Omega - \omega - 2\mu B_0\cos\theta)c_1 e^{i\frac{\Omega t}{2}} - (\Omega + \omega + 2\mu B_0\cos\theta)c_2 e^{-i\frac{\Omega t}{2}}] \tag{7.1.38}$$

(b) 有了普遍解以后可以考察一个具体的动力学过程. 选择在 $t=0$ 时，场强 $\boldsymbol{B}$ 在 $x-z$ 平面上，粒子的自旋方向也取在相同的方向，即

$$\boldsymbol{B}(0) = B_0(\sin\theta\,\hat{x} + \cos\theta\,\hat{z}) \tag{7.1.39}$$

$$\psi(0) = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{7.1.40}$$

初始波函数 $\psi(0)$取(7.1.40)式的正确性可由

$$\langle\sigma_z\rangle=\left(\cos\frac{\theta}{2},\sin\frac{\theta}{2}\right)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

$$=\cos^2\frac{\theta}{2}-\sin^2\frac{\theta}{2}=\cos\theta \tag{7.1.41}$$

及

$$\langle\sigma_x\rangle=\left(\cos\frac{\theta}{2},\sin\frac{\theta}{2}\right)\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}=\sin\theta \tag{7.1.42}$$

得到验证.(7.1.40)式告诉我们 $\varphi_a(0)=\varphi_a^{(0)}(0)=\cos\frac{\theta}{2}$,$\varphi_b(0)=\varphi_b^{(0)}(0)=\sin\frac{\theta}{2}$.

在这样的近似条件下由(7.1.38)式可得

$$\varphi_b^{(0)}=\sin\frac{\theta}{2}\cong\frac{1}{2\mu B_0\sin\theta}[(2\mu B_0-2\mu B_0\cos\theta)c_1-(2\mu B_0+2\mu B_0\cos\theta)c_2]$$

即

$$\sin^2\frac{\theta}{2}c_1-\cos^2\frac{\theta}{2}c_2\cong\sin^2\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2} \tag{7.1.43}$$

这时由(7.1.37)式得

$$\varphi_a(0)=c_1+c_2=\cos\frac{\theta}{2} \tag{7.1.44}$$

由(7.1.43)和(7.1.44)式解得

$$c_1\cong\cos\frac{\theta}{2},c_2\cong 0 \tag{7.1.45}$$

再由(7.1.37)和(7.1.38)式知

$$\begin{aligned}\varphi_a(t)&\cong\cos\frac{\theta}{2}e^{i\mu B_0t}\\ \varphi_a^{(0)}(t)&\cong\sin\frac{\theta}{2}e^{i\mu B_0t}\end{aligned} \tag{7.1.46}$$

$$\varphi_a^{(0)}(t)\cong\cos\frac{\theta}{2}e^{i\mu B_0t}e^{-\frac{i\omega t}{2}} \tag{7.1.47}$$

于是有

$$\varphi_a^{(0)}(t)\cong\sin\frac{\theta}{2}e^{i\mu B_0t}e^{\frac{i\omega t}{2}}$$

利用上式便可以计算 t 时刻的自旋粒子的三个分量的期待值了.

以$\langle\sigma_x\rangle$的计算为例:

$$\begin{aligned}\langle\sigma_x\rangle_t &= (\varphi_a^{(0)*}(t)\quad \varphi_b^{(0)*}(t))\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{bmatrix}\varphi_a^{(0)}(t)\\ \varphi_b^{(0)}(t)\end{bmatrix}\\ &= \varphi_a^{(0)*}(t)\varphi_b^{(0)}(t)+\varphi_a^{(0)}(t)\varphi_b^{(0)*}(t)\\ &= 2\mathrm{Re}[\varphi_a^{(0)*}(t)\varphi_b^{(0)}(t)]\\ &= \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu B_0 t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}}\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu B_0 t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}}+\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu B_0 t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}}\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu B_0 t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}}\\ &= \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t})\end{aligned} \tag{7.1.48}$$

类似可得$\langle\sigma_z\rangle_t$.

下面分两种情况来讨论：

(i) 绝热条件成立. 在这个问题中，能级差定义为自旋粒子的自旋取向与 $\boldsymbol{B}$ 同向时和反向时的能量差 $\Delta E=\mu B_0\cos\theta-(-\mu B_0)\cos\theta=2\mu B_0\cos\theta$，磁场对粒子提供的外势的时间变化尺度显然为 $T\sim\dfrac{1}{\omega}$，因此由(7.1.16)式给出的绝热条件应为不等式

$$2\mu B_0\cos\theta\gg\omega \tag{7.1.49}$$

在(7.1.49)式成立的条件下，按(7.1.35)式，有

$$\Omega^2\approx(2\mu B_0\cos\theta)^2+4\,(\mu B_0\sin\theta)^2$$

即

$$\Omega\approx 2\mu B_0 \tag{7.1.50}$$

将上式代入(7.1.46)式，并继续利用(7.1.49)式的不等式得到

$$\langle\sigma_x\rangle\approx\sin\theta\cos\omega t \tag{7.1.51}$$

类似地可得

$$\langle\sigma_y\rangle_t\approx\sin\theta\sin\omega t \tag{7.1.52}$$

及

$$\langle\sigma_z\rangle_t\approx\cos\theta \tag{7.1.53}$$

从以上得到的结果可以看出：在绝热条件成立时，绝热近似的含义不仅是将传播子中的含 t 指数因子由 Et 改变成对应 $E(t)$ 展开的线性项，其余形式不变外，现在的具体例子还表明如果开始时粒子自旋的取向和场强方向一致则由(7.1.51)，(7.1.52)和(7.1.53)式知在任何时刻它都和场强取向一致. 换句话说，只要场强旋进足够慢，粒子的自旋始终保持和场强同步旋转.

(ii) 绝热条件不成立的情形. 绝热条件不成立时，就不能得到(7.1.51)式那样的结果. 同样，(7.1.52)和(7.1.53)式都不成立. 即是说，自旋的取向在以后的时刻不可能和场强同步旋进. 从物理机制去考虑，这也是自然的结果. 当场强随时间的变化很快时，粒子的自旋将不能通过相互作用跟上场强变化的步伐.

7.2 含时哈密顿量系统的不变算符方法

随着实验技术的发展，粒子囚禁在阱中或腔中的实验装置相继出现，囚禁粒子的外势常常是随时间变化的且变化不是缓慢的，因此讨论更普遍的含时哈密顿量的求解问题明显有重要的意义. 特别地，自从 Berry 提出含时哈密顿系统在参量空间经一闭合路径回到出发点时有一拓扑相因子的存在，这一问题的讨论就更具有紧迫性了. 此外，在量子信息、量子计算等领域中涉及受驱动的量子系统，这也需要关于含时问题的深入讨论. 下面首先讨论 Lewis 提出的不变算符理论，然后再介绍一种简明的方法.

7.2.1 Lewis 的不变算符

(a) 考虑一个具有含时哈密顿量 $H(t)$ 的系统，并假定相应地存在一个显含时间的、非平庸的被称为不变算符的厄米算符 $I(t)$ 满足以下的条件

$$\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}t}\equiv\frac{\partial I}{\partial t}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[I,H]=0 \tag{7.2.1}$$

$$I^{+}=I \tag{7.2.2}$$

另一方面，含时的薛定谔方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mid\psi(t)\rangle=H(t)\mid\psi(t)\rangle \tag{7.2.3}$$

可证 $I|\psi(t)\rangle$ 也满足上式. 证明如下：

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(I\mid\psi(t)\rangle)&=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial I}{\partial t}\mid\psi(t)\rangle+\mathrm{i}\hbar I\frac{\partial}{\partial t}\mid\psi(t)\rangle\\&=\mathrm{i}\hbar\left[\frac{\partial I}{\partial t}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[I(t),H(t)]+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}H(t)I(t)\right]\mid\psi(t)\rangle\\&=H(t)I(t)\mid\psi(t)\rangle\end{aligned}$$

上式的意义说得更明确一点是：如果 $|\psi(t)\rangle$ 是薛定谔方程(7.2.3)的解，则 $I(t)|\psi(t)\rangle$ 也是(7.2.3)式的解.

(b) 假定物理系统的 $I(t)$ 不含时间的微商. 记 $I(t)$ 的本征值为 λ 的本征态矢为 $|\lambda,\chi\rangle$，即 $|\lambda,\chi\rangle$ 满足

$$I(t)\mid\lambda,\chi\rangle=\lambda\mid\lambda,\chi\rangle \tag{7.2.4}$$

既然 $I(t)$ 是厄米算符，它的本征态矢应满足正交归一条件

$$\langle\lambda',\chi'\mid\lambda,\chi\rangle=\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\chi\chi'} \tag{7.2.5}$$

本征态矢 $|\lambda,\chi\rangle$ 中另一个指标 χ 存在的原因是在普遍情形下，除了 $I(t)$ 算符外还应有其他若干厄米算符和它一起组成完全系，才能完全确定一个态. χ 代表完备系的

其他算符的量子数. 可以证明本征值 λ 与时间无关且是实数.

对(7.2.4)式求时间的导数,得

$$\frac{\partial I}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle + I\frac{\partial}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle + \lambda\frac{\partial}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle \tag{7.2.6}$$

另一方面将(7.2.1)式的右方作用于$|\lambda,\chi\rangle$,得

$$\begin{aligned} &\mathrm{i}\hbar\frac{\partial I}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle + IH \mid \lambda,\chi\rangle - HI \mid \lambda,\chi\rangle \\ &= \mathrm{i}\hbar\frac{\partial I}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle + IH \mid \lambda,\chi\rangle - \lambda H \mid \lambda,\chi\rangle = 0 \end{aligned} \tag{7.2.7}$$

将$\langle\lambda',\chi'|$与(7.2.7)式作内积,有

$$\begin{aligned} &\mathrm{i}\hbar\langle\lambda',\chi' \mid \frac{\partial I}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle + \langle\lambda',\chi' \mid IH \mid \lambda,\chi\rangle - \lambda\langle\lambda',\chi' \mid H \mid \lambda,\chi\rangle \\ &= \mathrm{i}\hbar\langle\lambda',\chi' \mid \frac{\partial I}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle + (\lambda'-\lambda)\langle\lambda',\chi' \mid H \mid \lambda,\chi\rangle = 0 \end{aligned} \tag{7.2.8}$$

当取 $\lambda'=\lambda$ 时,上式成为

$$\langle\lambda,\chi' \mid \frac{\partial I}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle = 0 \tag{7.2.9}$$

现将(7.2.6)式也和$\langle\lambda,\chi|$作内积,等式左端变成

$$\begin{aligned} &\langle\lambda,\chi \mid \frac{\partial I}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle + \langle\lambda,\chi \mid I\frac{\partial}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle \\ &= \langle\lambda,\chi \mid \frac{\partial I}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle + \lambda\langle\lambda,\chi \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle \end{aligned}$$

右端变成

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \lambda}{\partial t}\langle\lambda,\chi \mid \lambda,\chi\rangle + \lambda\langle\lambda,\chi \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle \\ &= \frac{\partial \lambda}{\partial t} + \lambda\langle\lambda,\chi \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle \end{aligned}$$

即

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \langle\lambda,\chi \mid \frac{\partial I}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle = 0 \tag{7.2.10}$$

上式为零用到了(7.2.9)式. 这样就证明了 λ 与 t 无关.

(c) 下面将讨论如何找到 I 的本征态与薛定谔方程(7.2.3)的解之间的联系以帮助我们求含时系统的解. 将(7.2.10)式的$\frac{\partial \lambda}{\partial t}=0$ 代入(7.2.6)式,得

$$(\lambda - I)\frac{\partial}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle = \frac{\partial I}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle \tag{7.2.11}$$

用$\langle\lambda',\chi'|$与(7.2.11)式作内积,等式左端变成

$$\langle\lambda',\chi' \mid (\lambda - I)\frac{\partial}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle = (\lambda-\lambda')\langle\lambda',\chi' \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle$$

利用(7.2.8)式,等式右端变成

$$\langle\lambda',\chi' \mid \frac{\partial I}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\lambda-\lambda')\langle\lambda',\chi' \mid H \mid \lambda,\chi\rangle$$

即

$$\mathrm{i}\hbar(\lambda-\lambda')\langle\lambda',\chi' \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle = (\lambda-\lambda')\langle\lambda',\chi' \mid H \mid \lambda,\chi\rangle \quad (7.2.12)$$

当 $\lambda\neq\lambda'$ 时,消去因子 $(\lambda-\lambda')$,得

$$\mathrm{i}\hbar\langle\lambda',\chi' \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle = \langle\lambda',\chi' \mid H \mid \lambda,\chi\rangle \quad (7.2.13)$$

当然上面的等式不包括 $\lambda=\lambda'$ 的情况. 假如 $\lambda=\lambda'$ 时上式也成立的话,由于 $|\lambda',\chi'\rangle$ 是任意的,即可得到

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle = H \mid \lambda,\chi\rangle$$

上式表示 $|\lambda,\chi\rangle$ 就是薛定谔方程的解. 不过这还并不成立,因为它未包括 $\lambda=\lambda'$ 的情况.

(d) 由于假定 $I(t)$ 不含时间的微商,所以对 $|\lambda,\chi\rangle$ 作与 t 有关的规范变换

$$\mid \lambda,\chi\rangle_\alpha = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\chi}(t)} \mid \lambda,\chi\rangle \quad (7.2.14)$$

后,它们仍是 $I(t)$ 的正交归一本征态,且 $\lambda'\neq\lambda$ 时(7.2.13)式仍然成立. 上述结论直接可以看出,因为在 $I(t)$ 不含对时间 t 的微商时

$$I(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\chi}(t)} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\chi}(t)}I(t)$$

能否选择 $\alpha_{\lambda\chi}(t)$ 使(7.2.13)式对 $\lambda'=\lambda$ 时也成立呢? 如果成立的话,则 $|\lambda,\chi\rangle_\alpha$ 就是薛定谔方程的解. 于是,我们要求

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\chi}(t)} \mid \lambda,\chi\rangle) = H(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\chi}(t)} \mid \lambda,\chi\rangle)$$

即

$$\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\chi}(t)}\right) \mid \lambda,\chi\rangle + \mathrm{i}\hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\chi}(t)}\frac{\partial}{\partial t} \mid \lambda,\chi\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\chi}(t)}H \mid \lambda,\chi\rangle$$

$$-\hbar\frac{\mathrm{d}\alpha_{\lambda\chi}(t)}{\mathrm{d}t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\chi}(t)} \mid \lambda,\chi\rangle + \mathrm{i}\hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\chi}(t)}\frac{\partial \mid \lambda,\chi\rangle}{\partial t} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\chi}(t)}H \mid \lambda,\chi\rangle$$

两端消去共同因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\chi}(t)}$,得

$$\hbar\frac{\mathrm{d}\alpha_{\lambda\chi}(t)}{\mathrm{d}t} \mid \lambda,\chi\rangle = \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right) \mid \lambda,\chi\rangle$$

上式与 $\langle\lambda,\chi|$ 作内积,得到 $\alpha_{\lambda\chi}(t)$ 应满足的方程

$$\hbar\frac{\mathrm{d}\alpha_{\lambda\chi}(t)}{\mathrm{d}t} = \langle\lambda,\chi \mid \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right) \mid \lambda,\chi\rangle \quad (7.2.15)$$

与$\langle\lambda,\chi'|$作内积，则有更广泛一点的关系

$$\hbar\delta_{\chi\chi'}\frac{\mathrm{d}\alpha_{\lambda\chi}(t)}{\mathrm{d}t}=\langle\lambda,\chi'|\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H\right)|\lambda,\chi\rangle$$

至此，我们得到结论，将不变算符的本征态矢集作一个如(7.2.14)式的规范变换，其中的$\alpha_{\lambda\chi}(t)$只要满足(7.2.15)式，则变换后的本征态矢集就是含时薛定谔方程的解. 在解(7.2.15)式时，由于我们可以在初始时刻t_i取不同的初始值，因此解出的$\alpha_{\lambda\chi}(t)$可以不相同. 换句话说，$\alpha_{\lambda\chi}(t)$并不唯一.

在知道$I(t)$的新本征态集是薛定谔方程的解后，薛定谔方程的普遍解将取如下的表示

$$|t\rangle=\sum_{\lambda,\chi}c_{\lambda\chi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\chi}(t)}|\lambda,\chi\rangle \tag{7.2.16}$$

7.2.2　小结

(a) 给定系统的含时哈密顿量$H(t)$，求其含时的、非平庸的厄米算符，即不变算符$I(t)$. $I(t)$满足

$$\frac{\mathrm{d}I(t)}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial I(t)}{\partial t}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[I,H]=0$$

(b) 求$I(t)$的归一正交本征态矢集$\{|\lambda,\chi\rangle\}$.

(c) $I(t)$与H有共同本征态矢集. 因为即使$\{|\lambda,\chi,t\rangle\}$不是，也可通过与$t$有关的规范变换$\{|\lambda,\chi\rangle_\alpha=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\chi}}|\lambda,\chi\rangle\}$得到.

(d) 求解转换成求$I(t)$以及$|\lambda,\chi\rangle$和$\alpha_{\lambda\chi}(t)$的问题.

(e) $I(t)$并不唯一. 两个不同的$I_1(t)$和$I_2(t)$可以有不同的本征态，不同的时间微商及不同的与H的对易子，但最终得到的$|t\rangle$应当相同.

7.2.3　含时谐振子

下面以含时谐振子为例，阐明如何应用 Lewis 的不变算符理论. 含时谐振子的哈密顿量为

$$H(t)=\frac{1}{2m}[p^2+\Omega^2(t)q^2] \tag{7.2.17}$$

假定存在厄米的二次形式的不变算符

$$I(t)=\frac{1}{2}[\alpha(t)q^2+\beta(t)p^2+\gamma(t)\{q,p\}_+] \tag{7.2.18}$$

其中$\alpha(t)$，$\beta(t)$，$\gamma(t)$是时间的实函数，$\{q,p\}_+=qp+pq$. 在计算$\dot{I}(t)$之前，先作如下准备：

(a) $[q,p]=\mathrm{i}\hbar$ (7.2.19)

(b) $\dot{q}=\frac{1}{i\hbar}[q,H]=\frac{1}{m}p$

$$\dot{p}=\frac{1}{i\hbar}[p,H]=-\frac{1}{m}\Omega^2(t)q \tag{7.2.20}$$

(c)
$$\begin{aligned}\frac{\partial I}{\partial t}=&\frac{1}{2}[\alpha(t)(\dot{q}q+q\dot{q})+\dot{\alpha}(t)q^2+\beta(t)(\dot{p}p+p\dot{p})+\dot{\beta}(t)p^2\\&+\gamma(t)(\dot{q}p+q\dot{p}+\dot{p}q+p\dot{q})+\dot{\gamma}(t)\{q,p\}_+]\\=&\frac{1}{2}\left[\alpha(t)\frac{1}{m}(pq+qp)+\dot{\alpha}(t)q^2-\beta(t)\frac{\Omega^2(t)}{m}(qp+pq)\right]\\&+\dot{\beta}(t)p^2+\gamma(t)\left(\frac{2}{m}p^2-\frac{2\Omega^2(t)}{m}q^2\right)+\dot{\gamma}(t)\{q,p\}_+]\end{aligned} \tag{7.2.21}$$

(d)
$$\begin{aligned}\frac{1}{i\hbar}[I,H]=&\frac{1}{i\hbar}\Big(\frac{1}{4m}\alpha(t)[q^2\cdot p^2]+\frac{\Omega^2(t)}{4m}\beta(t)[p^2\cdot q^2]+\frac{\alpha(t)}{4m}[\{q\cdot p\}+p^2]\\&+\frac{\Omega^2(t)}{4m}\alpha(t)[\{q\cdot p\}+q^2]\Big)\end{aligned}$$

(e)
$$\begin{aligned}\frac{1}{i\hbar}[q^2,p^2]&=\frac{1}{i\hbar}(q^2p^2-p^2q^2)=\frac{1}{i\hbar}[q(i\hbar+pq)p-p(qp-i\hbar)q]\\&=\frac{1}{i\hbar}[i\hbar(qp+pq)+qpqp-pqpq]=\frac{1}{i\hbar}[2i\hbar(qp+pq)]\\&=2(qp+pq)\end{aligned}$$

$$\frac{1}{i\hbar}[p^2,q^2]=-2(qp+pq)$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{i\hbar}[\{q,p\}_+,p^2]&=\frac{1}{i\hbar}[(qp+pq)p^2-p^2(qp+pq)]\\&=\frac{1}{i\hbar}(qp^3+pqp^2-p^2qp-p^3q)\\&=\frac{1}{i\hbar}[(i\hbar+pq)p^2]\\&\quad+p(pq+i\hbar)p-p(qp-i\hbar)p-p^2(qp-i\hbar)\\&=\frac{1}{i\hbar}(4i\hbar p^2)=4p^2\end{aligned}$$

$$\frac{1}{i\hbar}[\{q,p\}_+,q^2]=-4q^2$$

综合以上结果有

$$\frac{1}{i\hbar}[I,H]=\frac{\alpha(t)}{2m}\{q,p\}_+-\frac{\Omega^2(t)}{2m}\beta(t)\{q,p\}_++\frac{\gamma(t)}{m}p^2-\frac{\Omega^2(t)}{m}\gamma(t)q^2 \tag{7.2.22}$$

根据(7.2.21)及(7.2.22)式得

$$\dot{I}=\frac{\partial I}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}[I,H]$$

$$= \frac{1}{2}\Big[\Big(\dot{\alpha} - \frac{2\Omega^2}{m}\gamma\Big)q^2 + \Big(\dot{\beta} + \frac{2}{m}\gamma\Big)p^2 + \Big(\dot{\gamma} + \frac{1}{m}\alpha - \frac{\Omega^2}{m}\beta\Big)\{q,p\}_+\Big] \tag{7.2.23}$$

为了使 I 成为不变算符，要求它满足如下的条件

$$\begin{aligned} \dot{\alpha} &= \frac{2\Omega^2}{m}\gamma \\ \dot{\beta} &= -\frac{2}{m}\gamma \\ \dot{\gamma} &= -\frac{1}{m}\alpha + \frac{\Omega^2}{m}\beta \end{aligned} \tag{7.2.24}$$

为了计算方便，引入 $\sigma(t)$，含

$$\beta(t) = \sigma^2(t) \tag{7.2.25}$$

代入(7.2.24)式的第二式，有

$$\gamma = - m\sigma\dot{\sigma} \tag{7.2.26}$$

将(7.2.24)式的第三式写成

$$\alpha = m^2(\dot{\sigma}^2 + \sigma\ddot{\sigma}) + \Omega^2\sigma^2 \tag{7.2.27}$$

将(7.2.26)，(7.2.27)式代入(7.2.24)式的第一式，有

$$m^2(2\dot{\sigma}\ddot{\sigma} + \dot{\sigma}\ddot{\sigma} + \sigma\dddot{\sigma}) + 2\Omega^2\sigma\dot{\sigma} + 2\Omega\dot{\Omega}\dot{\sigma}\sigma^2 = - 2\Omega^2\sigma\dot{\sigma}$$

即

$$\sigma\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m^2\ddot{\sigma} + \Omega^2\sigma) + 3\dot{\sigma}(m^2\ddot{\sigma} + \Omega^2\sigma) = 0 \tag{7.2.28a}$$

如记

$$m^2\ddot{\sigma} + \Omega^2\sigma = F$$

则(7.2.28a)式可改写为

$$\frac{\dot{F}}{F} + 3\,\frac{\dot{\sigma}}{\sigma} = 0 \tag{7.2.28b}$$

积分后为

$$\ln F + 3\ln\sigma = c'$$

即

$$F = m^2\ddot{\sigma} + \Omega^2\sigma = \frac{c}{\sigma^3} \tag{7.2.29}$$

代入(7.2.27)式，得

$$\begin{aligned} \alpha &= m^2(\dot{\sigma}^2 + \sigma\ddot{\sigma}) + \Omega^2\sigma^2 \\ &= m^2\dot{\sigma}^2 + \sigma m^2\ddot{\sigma} + \Omega^2\sigma^2 \\ &= m^2\dot{\sigma}^2 + \frac{c}{\sigma^2} \end{aligned} \tag{7.2.30a}$$

将得到的 α,β,γ 都用 σ 表示的(7.2.25),(7.2.26)及(7.2.30a)式代入(7.2.18)式,得到不变算符 I 用 σ 表示的表示式

$$I=\frac{1}{2}\left[\frac{c}{\sigma^2}q^2+(\sigma p-m\dot{\sigma}q)^2\right] \tag{7.2.30b}$$

其中 σ 可用(7.2.29)式解出. 为了将(7.2.29)式中的任意常数 c 消掉,引入

$$\sigma(t)=c^{\frac{1}{4}}b(t) \tag{7.2.31}$$

可将(7.2.30b)和(7.2.28)式改写为

$$I=\frac{\sqrt{c}}{2}\left[\frac{1}{b^2}q^2+(bp-m\dot{b}q)^2\right] \tag{7.2.32}$$

$$m^2\ddot{b}+\Omega^2(t)b-\frac{1}{b^3}=0 \tag{7.2.33}$$

实际上 c 取不同值去直接解(7.2.30)式只是取不同的但仍等价的不变算符而已. 因此,为简单记,可取 $c=1$.

得到了不变算符 I 的表示式(7.2.32)式后,接下来便可以讨论它的本征态矢和本征值. 为此定义一对与时间有关的湮灭及产生算符

$$\left.\begin{aligned}a&=(2)^{-\frac{1}{2}}\left[\frac{1}{b}q+\mathrm{i}(bp-m\dot{b}q)\right]\\a^+&=(2)^{-\frac{1}{2}}\left[\frac{1}{b}q-\mathrm{i}(bp-m\dot{b}q)\right]\end{aligned}\right\} \tag{7.2.34}$$

引入的算符 a,a^+ 满足正则关系式

$$\begin{aligned}[a,a^+]=&\frac{1}{2}\left[\frac{q}{b}+\mathrm{i}(bp-m\dot{b}q)\right]\left[\frac{q}{b}-\mathrm{i}(bp-m\dot{b}q)\right]\\&-\frac{1}{2}\left[\frac{q}{b}-\mathrm{i}(bp-m\dot{b}q)\right]\left[\frac{q}{b}+\mathrm{i}(bp-m\dot{b}q)\right]\\=&\,\mathrm{i}(pq-qp)=1\end{aligned} \tag{7.2.35}$$

根据(7.2.34)式,类似可得 I 用 a,a^+ 直接表示的表示式

$$I=\left(a^+a+\frac{1}{2}\right) \tag{7.2.36}$$

由于 a^+a 有如下的本征值及本征态矢

$$a^+a\mid n\rangle=n\mid n\rangle\quad(n=0,1,2,\cdots) \tag{7.2.37}$$

以及

$$a\mid n\rangle=n^{\frac{1}{2}}\mid n-1\rangle;\quad a^+\mid n\rangle=(n+1)^{\frac{1}{2}}\mid n+1\rangle \tag{7.2.38}$$

根据(7.2.36)式,$\{|n\rangle\}$也应是 I 的本征态矢,且本征值为

$$\lambda_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\quad(n=0,1,2,\cdots) \tag{7.2.39}$$

但是,按照前面的讨论,$\{|n\rangle\}$并非就是 $H(t)$的本征态矢,在普遍的情形下它们还会差一个与时间有关的相因子,所以还需要利用(7.2.15)式计算

$$\frac{\mathrm{d}\alpha_n}{\mathrm{d}t}=\langle n\mid\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-H\right)\mid n\rangle \tag{7.2.40}$$

下面分别计算(7.2.40)式的两项.

(a) 首先将 $H(t)$用 a,a^+表示出来.由(7.2.34)式可得

$$\begin{aligned}q&=\frac{b}{\sqrt{2}}(a+a^+)\\ p&=\frac{1}{\sqrt{2}i}\left[\left(\frac{1}{b}+\mathrm{i}m\dot{b}\right)a-\left(\frac{1}{b}-\mathrm{i}m\dot{b}\right)a^+\right]\end{aligned} \tag{7.2.41}$$

代入(7.2.17)式得

$$\begin{aligned}H=&\frac{1}{2m}(p^2+\Omega^2q^2)\\ =&\frac{1}{2m}\Big[-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{b}+\mathrm{i}m\dot{b}\right)^2a^2-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{b}-\mathrm{i}m\dot{b}\right)^2a^{+^2}+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{b}+\mathrm{i}m\dot{b}\right)\left(\frac{1}{b}-\mathrm{i}m\dot{b}\right)aa^+\\ &+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{b}-\mathrm{i}m\dot{b}\right)\left(\frac{1}{b}+\mathrm{i}m\dot{b}\right)aa^++\Omega^2\frac{b^2}{2}(a+a^+)^2\Big]\\ =&\frac{1}{2m}\Big[-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{b^2}-m^2\dot{b}^2+2\mathrm{i}m\frac{\dot{b}}{b}\right)a^2-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{b^2}-m^2\dot{b}^2-2\mathrm{i}m\frac{\dot{b}}{b}\right)a^{+^2}\\ &+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{b^2}+m^2\dot{b}^2\right)(aa^++a^+a)+\frac{\Omega^2b^2}{2}(a^2+a^{+^2}+aa^++a^+a)\Big]\end{aligned} \tag{7.2.42}$$

将上式代入(7.2.40)式并利用$\langle n|a^2|n\rangle=\langle n|a^{+2}|n\rangle=0$,可得

$$\langle n\mid H\mid n\rangle=\frac{1}{4m}\left(m^2\dot{b}^2+\Omega^2b^2+\frac{1}{b^2}\right)\langle n\mid\{a,a^+\}\mid n\rangle \tag{7.2.43}$$

再利用(7.2.33)式,上式可改写为

$$\langle n\mid H\mid n\rangle=\frac{1}{2m}\left(m^2\dot{b}^2+\frac{2}{b^2}-m^2b\ddot{b}\right)\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{7.2.44}$$

(b) 由(7.2.38)式的第二式 $a^+|n-1\rangle=(n)^{\frac{1}{2}}|n\rangle$出发,两端对 t 微分,得

$$\frac{\partial a^+}{\partial t}\mid n-1\rangle+a^+\frac{\partial}{\partial t}\mid n-1\rangle=(n)^{\frac{1}{2}}\frac{\partial}{\partial t}\mid n\rangle$$

将上式与$\langle n|$作内积

$$\langle n\mid\frac{\partial a^+}{\partial t}\mid n-1\rangle+\langle n\mid a^+\frac{\partial}{\partial t}\mid n-1\rangle=(n)^{\frac{1}{2}}\langle n\mid\frac{\partial}{\partial t}\mid n\rangle$$

即

$$\langle n\mid\frac{\partial a^+}{\partial t}\mid n-1\rangle+(n)^{\frac{1}{2}}\langle n-1\mid\frac{\partial}{\partial t}\mid n-1\rangle=(n)^{\frac{1}{2}}\langle n\mid\frac{\partial}{\partial t}\mid n\rangle$$

最后得

$$\langle n \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid n\rangle = \langle n-1 \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid n-1\rangle + (n)^{-\frac{1}{2}}\langle n \mid \frac{\partial a^+}{\partial t} \mid n-1\rangle \tag{7.2.45}$$

另一方面,由(7.2.34)的第二式得出

$$\begin{aligned}
\frac{\partial a^+}{\partial t} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[-\frac{\dot b}{b^2}q + \frac{1}{b}\dot q - \mathrm{i}(\dot b p + b\dot p - m\ddot b q - m\dot b\dot q)\Big] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\Big(\mathrm{i}m\ddot b - \frac{\dot b}{b^2}\Big)q + \Big(\frac{1}{b} + \mathrm{i}m\dot b\Big)\dot q - \mathrm{i}\dot b p - \mathrm{i}b\dot p\Big] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\Big(\mathrm{i}m\ddot b - \frac{\dot b}{b^2}\Big)q + \Big(\frac{1}{b} + \mathrm{i}m\dot b\Big)\frac{p}{m} - \mathrm{i}\dot b p + \mathrm{i}b\frac{\Omega^2}{m}q\Big] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\Big(\mathrm{i}m\ddot b + \mathrm{i}b\frac{\Omega^2}{m} - \frac{\dot b}{b^2}\Big)\frac{b}{\sqrt{2}}(a + a^+) + \frac{1}{mb\sqrt{2}\mathrm{i}}\Big(\frac{1}{b} + \mathrm{i}m\dot b\Big)a \\
&\quad - \frac{1}{mb\sqrt{2}\mathrm{i}}\Big(\frac{1}{b} - \mathrm{i}m\dot b\Big)a^+\Big] \\
&= \frac{1}{2}\Big[\Big(\mathrm{i}mb\ddot b + \mathrm{i}b^2\frac{\Omega^2}{m} - \frac{\dot b}{b} - \mathrm{i}\frac{1}{mb^2} + \frac{\dot b}{b}\Big)a + \Big(\mathrm{i}mb\ddot b + \mathrm{i}b^2\frac{\Omega^2}{m} \\
&\quad - \frac{\dot b}{b} + \mathrm{i}\frac{1}{mb^2} + \frac{\dot b}{b}\Big)a^+\Big] \\
&= \frac{1}{2}\Big[\Big(\mathrm{i}mb\ddot b + \mathrm{i}b^2\frac{\Omega^2}{m} - \frac{\mathrm{i}}{mb^2}\Big)a + \Big(\mathrm{i}mb\ddot b + \mathrm{i}\frac{b^2\Omega^2}{m} + \frac{\mathrm{i}}{mb^2}\Big)a^+\Big]
\end{aligned} \tag{7.2.46}$$

将(7.2.46)式代入(7.2.45)式,得

$$\begin{aligned}
\langle n \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid n\rangle &= \langle n-1 \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid n-1\rangle + (n)^{-\frac{1}{2}}\langle n \mid \mathrm{i}\Big(mb\ddot b + \frac{b^2\Omega^2}{m} + \frac{1}{mb^2}\Big)a^+ \mid n-1\rangle \\
&= \langle n-1 \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid n-1\rangle + \mathrm{i}\Big(mb\ddot b + \frac{b^2\Omega^2}{m} + \frac{1}{mb^2}\Big)
\end{aligned} \tag{7.2.47}$$

利用(7.2.33)式可将(7.2.47)式改写为

$$\begin{aligned}
\langle n \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid n\rangle &= \langle n-1 \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid n-1\rangle + \mathrm{i}\frac{2}{mb^2} \\
&= \langle n-2 \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid n-2\rangle + 2\mathrm{i}\frac{2}{mb^2} \\
&\cdots \\
&= \langle 0 \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid 0\rangle + n\mathrm{i}\frac{2}{mb^2}
\end{aligned} \tag{7.2.48}$$

(7.2.48)式中的$\langle 0|\frac{\partial}{\partial t}|0\rangle$还没有确定.如果它也确定了,则可将(7.2.48)式及(7.2.44)式代到(7.2.40)式中,即可求出α_n来.

现在把这一小节的内容作一个小结：(i)以一维谐振子为例说明在含时的情况下如何求不变算符 $I(t)$及其本征值和本征态矢集. (ii)要具体得到结果，最终归结为求 $b(t)$，它满足(7.2.33)式表示的一个非线性微分方程. (iii)解(7.2.34)式需先知道 $\Omega(t)$的具体函数形式. 即使知道了 $\Omega(t)$，求一个非线性方程也非易事. 我们将在下一节中针对一个特定的 $\Omega(t)$讨论这种类型的非线性微分方程的求解. (iv)求出$b(t)$后，按(7.2.34)式便知道 a 的具体算符形式，然后从 $a|0\rangle=0$ 的要求可以得到$|0\rangle$的表示，从而求出$\langle 0|\frac{\partial}{\partial t}|0\rangle$来.

7.3　Paul 阱中的粒子

上节中介绍了含时哈密顿量系统的不变算符理论. 从中可以看到它是一个系统的理论，构成了求解这类问题的理论基础. 不过从描述该理论的过程中也可以看出，应用该方法求解是相当繁复的. 本节将介绍一种针对不同的问题将系统的哈密顿量作适当的函数变换和变量变换使之退化为不含时哈密顿量的方法，从而使问题能直接得到严格解.

7.3.1　阱中粒子的动力学

为了与前面的不变算符方法相比较，这里要讨论的具体系统是 Paul 阱中粒子的动力学问题. 这个问题中的势是含时的，$V(x,t)=\frac{1}{2}(U+V\cos\omega t)x^2\equiv\frac{1}{2}\Omega(t)x^2$，因此它的薛定谔方程为

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)+\frac{1}{2}\Omega^2(t)x^2\psi(x,t)\tag{7.3.1}$$

注意这里已把一般的含时谐振子势中的 $\Omega(t)$取定为一个确定的函数了.

为了将它化为不含时的谐振子问题，下面依次作适当的函数变换及变量变换.

(a) 作函数变换

$$\psi(x,t)=\left[\exp\left(-\int_0^t\alpha(t')\mathrm{d}t'\right)\right][\exp(\mathrm{i}\alpha(t)x^2)]\varphi_1(x,t)\tag{7.3.2}$$

代入(7.3.1)式将它化为 $\varphi_1(x,t)$满足的方程.

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\varphi_1(x,t)=-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_1(x,t)-2\mathrm{i}\alpha(t)x\frac{\partial}{\partial x}\varphi_1(x,t)$$
$$+\left[2\alpha^2(t)+\dot{\alpha}(t)+\frac{1}{2}\Omega^2(t)\right]x^2\varphi_1(x,t)\tag{7.3.3}$$

在(7.3.2)式中引入的函数 $\alpha(t)$是一个待定的函数.

(b) 将 $\alpha(t)$改写成

$$\alpha(t)=\frac{\dot{\varphi}(t)}{4\varphi(t)} \tag{7.3.4}$$

这样就把求待定的 $\alpha(t)$转化为求待定的 $\varphi(t)$. 再作变量变换

$$y=\varphi^{-\frac{1}{2}}(t)x \tag{7.3.5}$$

$$s=\int^{t}\varphi^{-1}(\sigma)\mathrm{d}\sigma \tag{7.3.6}$$

并令

$$\varphi(y,s)=\varphi_1(x,t) \tag{7.3.7}$$

作了这样一些变换后,(7.3.3)式可以改写成

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial s}\varphi(y,s)=-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\varphi(y,s)+\left(\frac{1}{4}\ddot{\varphi}\varphi-\frac{1}{8}\dot{\varphi}^2+\frac{1}{2}\Omega^2(t)\varphi^2\right)y^2\varphi(y,s) \tag{7.3.8}$$

注意在(7.3.8)式右方第二项中的圆括号内保留了对自变量 t 的导数形式.

(c) 从(7.3.8)式可以看清楚前面的函数变换及变量变换的目的. (7.3.8)式除右方第二项中的圆括号外,其余两项的形式正是不含时谐振子系统的薛定谔方程的项,而圆括号中的是未定的 φ 及其微商,自然会想到要求它满足

$$\frac{1}{4}\ddot{\varphi}\varphi-\frac{1}{8}\dot{\varphi}^2+\frac{1}{2}\Omega^2(t)\varphi^2=c \tag{7.3.9}$$

其中 c 为常数. φ 如满足上述条件,则(7.3.8)式就完全转化成了不含时谐振子的薛定谔方程.

由于不含时谐振子的薛定谔方程的解是已知的,因此便可以立即写出它的波函数来

$$\varphi_n(y,s)=N_n\exp\left(-\frac{1}{2}z^2y^2\right)H_n(zy)\exp(-\mathrm{i}E_ns) \tag{7.3.10}$$

其中

$$\begin{aligned}N_n&=\left(\frac{z}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}\\ z&=c^{\frac{1}{4}}\\ E_n&=\left(n+\frac{1}{2}\right)\sqrt{c}\end{aligned} \tag{7.3.11}$$

H_n 是厄米特多项式. 最后再将得到的解变回到用 x,t 表示的形式

$$\psi(x,t)=M_n\varphi^{-\frac{1}{4}}H_n(c^{\frac{1}{4}}\varphi^{-\frac{1}{2}}x)\exp\left[\mathrm{i}\alpha(t)x^2-\frac{1}{2}c^{\frac{1}{2}}x^2/\varphi\right]\exp\left[-\mathrm{i}\left(n+\frac{1}{2}\right)\sqrt{c}\int_{t_0}^{t}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\varphi(\sigma)}\right] \tag{7.3.12}$$

其中

$$M_n=(c^{\frac{1}{4}}/2^n n!\sqrt{\pi}\Delta T)^{\frac{1}{2}}$$

$$\Delta T = t - t_0 \tag{7.3.13}$$

(d) 不变算符方法是一个系统的方法，它构成了含时哈密顿量系统求解的理论基础，而函数及变量变换方法需要依赖于系统的具体性质去找寻特定的适当的变换. 其次，不变算符方法是比较繁复的，先要找寻系统的不变算符，然后去求算符的本征解，最后还要计算应有的相因子后才能得到问题的解，而变换方法一旦找到了恰当的变换则解就能得到了. 最后需要指出的一点是，两种方法都有一个待定函数的求解问题，特定函数满足的是一个非线性方程. 不变算法要解的方程是(7.2.33)式，变换方法要解的是(7.3.9)式. 不论用哪种方法都避免不了解非线性方程的问题，而在众多的非线性方程中只有很少数能得到解析形式的精确解，所以不论用哪种方法去解含时哈密顿量问题一般都会碰到这样的数学上的困难. 下面针对含时谐振子系统的非线性微分方程给出一种半解析形式的函数级数解法. 对于其他的含时哈密顿量问题或许也有启发意义.

7.3.2　函数级数方法的应用

现在我们用函数级数法来解方程(7.3.9).

在本问题中 $\Omega^2(t)=U+V\cos(\omega t)$. 为了使(7.3.9)式变得更加简洁，令

$$\varphi(t) = B^2(t) \tag{7.3.14}$$

代入(7.3.9)式，得

$$B^3(t)\ddot{B}(t) + \Omega^2(t)B^4(t) = c \tag{7.3.15}$$

假定 $B(t)$是如下的函数级数之和

$$B(t) = \sum_{k=0}^{\infty} B_k \cos^k(\omega t) \tag{7.3.16}$$

首先一定有

$$B_0 = \left(\frac{c}{U}\right)^{\frac{1}{4}} \tag{7.3.17}$$

其次引入四种记号

$$\begin{aligned}
F_1^n &= \sum_{i+j=l+m=n}{}' m^2 B_i B_j B_l B_m \\
F_2^n &= \sum_{i+j=l+m=n} m(m-1) B_i B_j B_l B_m \\
F_3^n &= \sum_{i+j=l+m=n} B_i B_j B_l B_m \\
F_4^n &= \sum_{i+j=l+m=n}{}' B_i B_j B_l B_m
\end{aligned} \tag{7.3.18}$$

其中求和号 $\sum'$ 表示求和中应除去 $B_0^3 B_n$. 将(7.3.16)式代入(7.3.15)式，比较同幂次的系数，即可得到 B_k 的递推公式

$$B_k = \frac{1}{k^2\omega^2 B_0^3 - 4UB_0^3}(-\omega^2 F_1^k + \omega^2 F_2^{k+2} + UF_4^k + VF_3^{k-1}) \qquad (7.3.19)$$

于是这个问题便得到了答案.

最后提出两点:第一,实际计算时,自然不会将 B_k 算到无穷多个. 对于一定的参数算到足够高的阶,精度就会达到我们的要求. 第二,c 的取值任意性实质就是不变算符方法中存在许多等价的不变算符,因此 c 取不同值的结果是等价的,不过在作函数级数解时,这种任意性可以用来帮助我们选取适当的 c 使级数收敛得更快.

7.4 Berry 相

本节要讨论的是在哈密顿量与 t 有关的系统中出现的一个具有物理意义的相因子,这种相因子被称为 Berry 相因子. 为了清楚地阐明它的物理根源和性质,下面在绝热近似条件成立的情形下来讨论,因为在这种条件下可以使整个的物理图像看得更清楚.

7.4.1 不含时哈密顿量系统的动力学回顾

首先回顾一下前面讨论过的动力学内容. 如果一个系统的哈密顿量是不含时的且我们能解出它的定态方程

$$H\varphi_n(\boldsymbol{x}) = E_n\varphi_n(\boldsymbol{x}) \qquad (7.4.1)$$

那么它的传播子 D_F 就可表示为

$$D_F(\boldsymbol{x}_2, t_2, \boldsymbol{x}_1, t_1) = \sum_n \varphi_n(\boldsymbol{x}_2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(t_2-t_1)}\varphi_n^*(\boldsymbol{x}_1) \qquad (7.4.2)$$

如果一个系统的哈密顿量是含时的 $H(t)$ 而且我们也能解出它的瞬时本征值及本征波函数

$$H(t)\psi_n(\boldsymbol{x}, t) = E_n(t)\psi_n(\boldsymbol{x}, t)$$

那么在绝热近似条件成立的情况下,系统的传播子(7.1.18)式可以近似地表示为

$$D_F(\boldsymbol{x}_2, t_2, \boldsymbol{x}_1, t_1) = \sum_n \psi_n(\boldsymbol{x}_2, t_2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}tE_n(t)}\psi_n^*(\boldsymbol{x}_1, t_1) \qquad (7.4.3)$$

比较(7.4.2)和(7.4.3)式可以看出,在绝热近似下,含时哈密顿量系统的传播子和不含时的形式几乎是一样的了,唯一不同之处是动力学因子从 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(t_2-t_1)}$ 换成了 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_1}^{t_2}E_n(t)\mathrm{d}t}$. 下面将把在绝热近似下的(7.4.3)式变换为另外一种形式,并从中引入我们要讨论的 Berry 相因子.

7.4.2　拓扑相因子

一个含时的哈密顿量一般是哈密顿量中某些物理参量是随时间变化的. 例如，在 7.1.3 中讨论的自旋粒子在磁场中的运动，那里场强的大小虽然不变，但方向随 t 而变. 又如，一个谐振子的哈密顿量如取如下的形式

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}k(t)x^2 \tag{7.4.4}$$

其中物理参量 $k(t)$ 是时间的函数. 因此，作为普遍的表现形式，可把含时的哈密顿量记为 $H(r(t))$，r 是一个参量. 当然还可以将下面的讨论直接推广到多于一个含时参量的更普遍的情形. 这里为简便记只讨论一个参量的情形. 于是瞬时本征方程为

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_n(\boldsymbol{x},t) = H(r(t))\psi_n(\boldsymbol{x},t) \tag{7.4.5}$$

将 $\psi_n(\boldsymbol{x},t)$ 改写成

$$\psi_n(\boldsymbol{x},t) = \varphi_n(\boldsymbol{x},t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_1}^{t}\mathrm{d}t' E_n(t')}a_n(t) \tag{7.4.6}$$

其中的 $\varphi_n(\boldsymbol{x},t)$ 叫做瞬时的本征波函数.

将(7.4.6)式代入(7.4.5)式，得

$$\mathrm{i}[\dot{\varphi}_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int\mathrm{d}t'E_n(t')}a_n - \mathrm{i}\varphi_n E_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int\mathrm{d}t'E_n(t')}a_n + \varphi_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int\mathrm{d}t'E_n(t')}\dot{a}_n] = E_n\varphi_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int\mathrm{d}t'E_n(t')}a_n$$

消去上式左右方相同的项，得到

$$\mathrm{i}\dot{\varphi}_n(\boldsymbol{x},t)a_n(t) + \mathrm{i}\varphi_n(\boldsymbol{x},t)\dot{a}_n(t) = 0 \tag{7.4.7}$$

到此为止，对于在(7.4.6)式中引入的函数 $a_n(t)$ 具有什么样的性质还没有进行过讨论. (7.4.6)式左方的 $\psi_n(\boldsymbol{x},t)$ 自然应当是归一的，即

$$\int\psi_n^*(\boldsymbol{x},t)\psi_n(\boldsymbol{x},t)\mathrm{d}\boldsymbol{x} = 1 \tag{7.4.8}$$

如果我们也要求 $\varphi_n(\boldsymbol{x},t)$ 是归一的，即

$$\int\varphi_n^*(\boldsymbol{x},t)\varphi_n(\boldsymbol{x},t)\mathrm{d}\boldsymbol{x} = 1 \tag{7.4.9}$$

这会对 $a_n(t)$ 有什么要求呢？根据(7.4.6)式可将(7.4.8)式改写成

$$\int|\varphi_n(\boldsymbol{x},t)|^2\ |a_n(t)|^2\mathrm{d}\boldsymbol{x} = 1 \tag{7.4.10}$$

现在对(7.4.9)和(7.4.10)式两端作 t 的微商，得

$$\int\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_n(\boldsymbol{x},t)|^2\mathrm{d}\boldsymbol{x} = 0 \tag{7.4.11}$$

以及

$$
\begin{aligned}
0 &= \int \frac{\partial}{\partial t}(|\varphi_n(\boldsymbol{x},t)|^2\ |a_n(t)|^2)\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} \\
&= \int \frac{\partial}{\partial t}(|\varphi_n(\boldsymbol{x},t)|^2)\ |a_n(t)|^2\mathrm{d}\boldsymbol{x} + \int |\varphi_n(\boldsymbol{x},t)|^2 \frac{\partial}{\partial t}|a_n(t)|^2\mathrm{d}\boldsymbol{x} \\
&= |a_n(t)|^2 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int |\varphi_n(\boldsymbol{x},t)|^2\mathrm{d}\boldsymbol{x} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\ |a_n(t)|^2\int |\varphi_n(\boldsymbol{x},t)|^2\mathrm{d}\boldsymbol{x} \\
&= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\ |a_n(t)|^2
\end{aligned}
\tag{7.4.12}
$$

上式可改写成

$$
a_n(t)\dot{a}_n^*(t) + a_n^*(t)\dot{a}_n(t) = 0 \tag{7.4.13}
$$

再考虑到如(7.4.9)和(7.4.10)两式成立,则要求$|a_n(t)|^2=1$,因此(7.4.13)式的解是

$$
a_n(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\rho_n(t)} \tag{7.4.14}
$$

其中

$$
\dot{\rho}_n(t) = \mathrm{i}\int \mathrm{d}\boldsymbol{x}\varphi_n^*(\boldsymbol{x},t)\dot{\varphi}_n(\boldsymbol{x},t) \tag{7.4.15}
$$

上式的证明如下:将(7.4.14)式代入(7.4.7)式,有

$$
\begin{aligned}
0 &= \mathrm{i}\dot{\varphi}_n(\boldsymbol{x},t)a_n(t) + \mathrm{i}\varphi_n(\boldsymbol{x},t)\dot{a}_n(t) \\
&= \mathrm{i}\dot{\varphi}_n(\boldsymbol{x},t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\rho_n(t)} - \dot{\rho}_n(t)\varphi_n(\boldsymbol{x},t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\rho_n(t)}
\end{aligned}
$$

消掉共同因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\rho_n(t)}$,得

$$
\mathrm{i}\dot{\varphi}_n(\boldsymbol{x},t) - \dot{\rho}_n(t)\varphi_n(\boldsymbol{x},t) = 0
$$

上式乘以 $\varphi_n^*(\boldsymbol{x},t)$及对 $\boldsymbol{x}$ 积分,同时利用(7.4.9)式便得到(7.4.15)式.综合以上的讨论,可以由(7.4.3)式得出传播子 $D_F(\boldsymbol{x}_2,t_2,\boldsymbol{x}_1,t_1)$的表达式为

$$
D_F(\boldsymbol{x}_2,t_2,\boldsymbol{x}_1,t_1) = \sum_n \varphi_n(\boldsymbol{x}_2,t_2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}tE_n(t)}\varphi_n^*(\boldsymbol{x}_1,t_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\rho_n(t_2)-\mathrm{i}\rho_n(t_1)} \tag{7.4.16}
$$

从(7.4.16)的表达式看出:①如果我们考虑的是从 $\boldsymbol{x}$ 出发又回到 $\boldsymbol{x}$ 的循回路径的传播子,则在传播子的表达式中归一正交的 $\psi_n(\boldsymbol{x},t)$换成了 $\varphi_n(\boldsymbol{x},t)$. ②除了 $\rho_n(t_2)-\rho_n(t_1)=2n\pi$ 的特殊情况外,新的相因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\rho_n(t_2)-\mathrm{i}\rho_n(t_1)}$ 会和原来的动力学相因子 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}tE_n(t)}$一样起着干涉的效应.这种新的相因子被称为 Berry 相因子.因为它是从出发点开始沿参量空间的闭合路径又回到出发点产生的相因子,故可将其称为拓扑相因子.只要仔细想一想,这里并没有产生新的物理内容,因为这个拓扑相因子的出现是由于在(7.4.16)式中将 ψ_n 换成了 φ_n 造成的,实质上和(7.4.3)式是一回事.不过通过上述的讨论,还是启发了我们去讨论如何确定 $\rho_n(t)$并因此获得拓扑相因子带来的新的物理意义.

7.4.3 相因子 $\rho_n(t)$是如何确定的

因为 $H(r(t))$含时来自其中的参量 r 含时,所以 $\varphi_n(\boldsymbol{x},t)$也可写成 $\varphi_n(\boldsymbol{x},r(t))$

的形式,即它是一个复合函数.将这一形式代入(7.4.15)式,有

$$
\begin{aligned}
\dot{\rho}_n(t) &= \mathrm{i}\int \mathrm{d}\boldsymbol{x}\varphi_n^*(\boldsymbol{x},r(t))\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\varphi_n(\boldsymbol{x},r(t)) \\
&= \mathrm{i}\int \mathrm{d}\boldsymbol{x}\varphi_n^*(\boldsymbol{x},r(t))\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\varphi_n(\boldsymbol{x},r(t))\dot{r}(t) \\
&= \mathrm{i}\langle n,r(t)\mid\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mid n,r(t)\rangle\dot{r}(t)
\end{aligned}
\tag{7.4.17}
$$

在上式中将态矢记为$|n,r(t)\rangle$是因为不同的瞬时本征矢除了用n来标识外,本征态矢也与瞬间的参量值$r(t)$有关.将(7.4.17)式在t_1到t_2的时间段里作积分,得

$$
\begin{aligned}
\rho_n &= \int_{t_1}^{t_2}\dot{\rho}_n(t)\mathrm{d}t \\
&= \mathrm{i}\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\dot{r}(t)\langle n,r(t)\mid\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mid n,r(t)\rangle \\
&= \mathrm{i}\oint\mathrm{d}r\langle n,r(t)\mid\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mid n,r(t)\rangle
\end{aligned}
\tag{7.4.18}
$$

上式的结果带来了新的物理内容,因为从中可以看出当该物理系统从$H(r(t_1))$出发,在参数空间中经过了一个闭合路径到达$H(r(t_2))$时,如果$r(t_1)=r(t_2)$,则从哈密顿量来看,它回到了原来的瞬时哈密顿量,其瞬时本征态矢似应也回到原来的态矢.但(7.4.18)式却告诉我们这时的态矢增加了一个相因子ρ_n,说得确切一点是含时哈密顿量系统的瞬时本征态不但依赖于哈密顿量还和演化过程有关.每当它在参数空间走完一个闭合路径,态矢就会增加一个相因子ρ_n.

这里也许会产生一个疑问.虽然系统经一个闭合路径回到原来的瞬时哈密顿量时$|n,r\rangle$态多出了一个相因子ρ_n,但一个态矢多一个相因子应当是没有物理效应的.如果只有唯一的一个态矢,差一个相因子的确没有物理效应.不过一般的态是由许多瞬时本征态矢组成的.当走完一个闭合路径时,如不同n的ρ_n是不同的,则该态矢的变化便并非是一个单一的相因子变化.不同的ρ_n的相因子之间就会产生干涉效应.

也许还会提出第二问题.当我们专注于一个特定的$|n,r\rangle$时,它在t_1的出发时刻允许有一个相变换

$$
|n,r\rangle\to\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta(r)}|n,r\rangle \tag{7.4.19}
$$

那么,如果不从$|n,r\rangle$出发而从$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta(r)}|n,r\rangle$出发,得到的$\rho_n$还是一样的吗?如果结果不相同,显然$\rho_n$还仍然不是实质的物理效应.为了回答这一问题,由(7.4.19)式可得

$$
\begin{aligned}
\rho_n &= \mathrm{i}\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\dot{r}(t)\langle n,r(t)\mid\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta(r)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta(r)}\mid n,r(t)\rangle \\
&= \mathrm{i}\oint\mathrm{d}r\left[\langle n,r(t)\mid\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mid n,r(t)\rangle+\langle n,r(t)\mid\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}\delta(r)}{\mathrm{d}r}\mid n,r(t)\rangle\right]
\end{aligned}
$$

$$= \mathrm{i}\oint \mathrm{d}r\langle n,r(t) \mid \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \mid n,r(t)\rangle - \oint\langle n,r(t) \mid \mathrm{d}\delta(r) \mid n,r(t)\rangle$$

$$= \mathrm{i}\oint \mathrm{d}r\langle n,r(t) \mid \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \mid n,r(t)\rangle \tag{7.4.20}$$

结果得到的 ρ_n 是一样的，因此讨论的拓扑相因子是与相变换无关的. 最后要回答的问题是在上一小节最后一段里曾谈到，Berry 相因子是通过(7.4.6)式的由 ψ_n 到 φ_n 的变换引入的. 似乎它只有一个形式变换的意义. 答案是如果这样引入的 δ_n 和 n 无关，那么正如上面回答的第一个问题那样，它不具有真正的物理意义. 但如 δ_n 依 n 的不同而异，那么 Berry 相因子就具有真实的物理效应. 自从 Berry 提出这样的理论后，许多研究工作对一些物理系统进行过讨论并得到了肯定的回答.



第 8 章　相　干　态

普通量子力学教科书里讲授最多的 Hilbert 空间的基，一般采用的都是粒子数一定的态矢. 具有相同粒子数的态矢组成一个子空间，整个态矢空间由那些不同粒子数的态矢子空间组成. 换句话说，全部态矢空间由各个不同的 n 的子空间组成. 每一个子空间内有各自的正交归一基. 事实上我们在第 1 章里讲多体的波函数，就是在这样的基上展开的. 这种展开称之为粒子数表象.

从物理图像的角度考虑，这种粒子数表象是容易理解的. 但是如果从物质的相互作用的角度来看，这种表象似乎也有不方便之处. 例如，前面讲到粒子与光子的作用，粒子从一种状态经作用转变到另一种状态时，作用结果可能产生一个光子，也可能湮灭一个光子. 因此尽管最初状态是一个确定光子数的态，经过不断的相互作用也会产生出各种光子数的态矢分量来，一般来说，系统的态矢中会包含所有 n 的子空间的态矢分量. 粒子数表象在这种情形下也许不是最方便的.

那么能否想象引入一种基，它在图 8.1 中的每一个 n 的子空间里都有分量呢？或者说把图 8.1 的态矢空间纵向划分为一些子空间，而每一个基是这种纵向子空间中的一个特定的态矢，使其更适于描述相互作用的情形. 这种基就是所谓的相干态. 不过，在后面我们将看到它不像粒子数表象中的基那样可以选为正交归一的态矢. 相干态可以归一，但并不正交.

在没有仔细讨论相干态的性质之前至少可以谈到一点，那就是从图 8.1 的大体定性的描绘可以看出相干态是含有所有不同 n 的态矢分量. 也即每一个相干态在粒子数表象中展开时一定有无穷多个态矢分量. 反之每一个粒子数表象里的基矢在相干态表象中展开时也会有无穷多个分量.

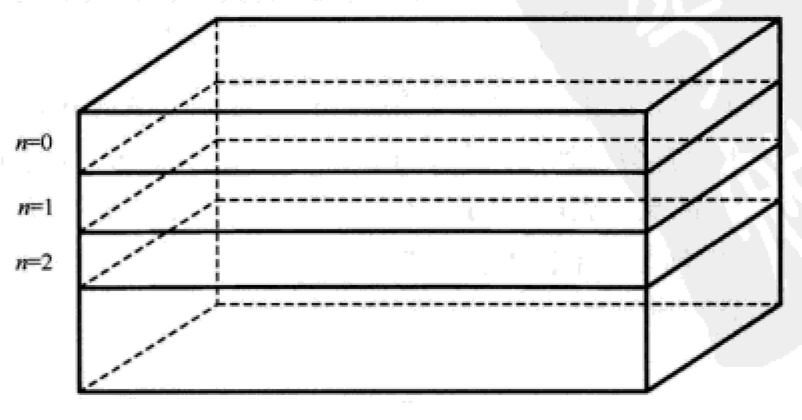


图 8.1

最后还要提到相干态在实际物理中的重要性. 例如，在量子光学的实验中容易制备出的光子体系常常处在相干态而不是光子数一定的状态.

8.1 玻色系统的相干态

玻色粒子系统的相干态性质和费米粒子系统相干态是很不同的，所以应当分别予以讨论. 在本节里将讨论玻色系统的相干态.

8.1.1 相干态的定义

相干态定义为湮灭算符的本征态，即

$$a_\alpha \mid \varphi_\alpha\rangle = \varphi_\alpha \mid \varphi_\alpha\rangle \tag{8.1.1}$$

其中 a_α 代表单粒子态 α 的湮灭算符，φ_α 表示某一个本征值，$|\varphi_\alpha\rangle$是相应的本征态. 人们也许会问是否也可以类似地定义一种产生算符的本征态呢？答案是否定的. 可以分析如下：任意态总可以在粒子数表象中展开为（为简单计，讨论只有一种单粒子状态$|\alpha\rangle$的情形）

$$|\varphi\rangle = \sum_{n_\alpha = n_0}^{\infty} A_{n_\alpha} \mid n_\alpha\rangle \tag{8.1.2}$$

n_α 表示在单粒子态$|\alpha\rangle$上占有的玻色子数. 可以取为 0，1，2，…，n_0 是这个态的最低玻色子占有数. 当用产生算符作用到态$|\varphi\rangle$上时，最低的占有数态粒子数 n_0 将变为 n_0+1，从而不可能重现原有的态$|\varphi\rangle$，因此不可能有产生算符的本征态. 但对湮灭算符来讲，情况就不一样了. 下面讨论相干态的存在及其显式表达.

8.1.2 玻色系统相干态的表示

为了使讨论具有普遍性，考虑玻色系统的所有单粒子态的完全量子数集$\{\alpha_i\}$. 将任一个态矢在粒子数表象中展开

$$|\varphi\rangle = \sum_{n_{\alpha_1}\cdots n_{\alpha_p}\cdots} A_{n_{\alpha_1},n_{\alpha_2}\cdots n_{\alpha_p}\cdots} \mid n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}\cdots n_{\alpha_p}\cdots\rangle \tag{8.1.3}$$

如果相干态的确存在并假定$|\varphi\rangle$就是要求的相干态，则当任意单粒子态的湮灭算符 a_{α_i} 作用到$|\varphi\rangle$上时都会得到某一个本征值乘上原来的态$|\varphi\rangle$. 同时按这一要求就能给出 $A_{n_{\alpha_1},n_{\alpha_2}\cdots n_{\alpha_p}\cdots}$ 的显式表达. 为了看得更清楚一些，先讨论只有一个单粒子态的情形，然后再推广到多个单粒子态的普遍情形.

这时普遍的态写成

$$|\varphi\rangle = \sum_{n}^{\infty} A_n \mid n\rangle_\alpha \tag{8.1.4}$$

$|n\rangle_\alpha$ 的下标 α 表示只讨论单一的单粒子态$|\alpha\rangle$的情形. 如果相干态存在，应有

$$a_\alpha \mid \varphi\rangle = \varphi_\alpha \mid \varphi\rangle \tag{8.1.5}$$

那么问题就是相对于本征值 φ_α，$\{A_n\}$应取什么样的值？要是能给出明显的$\{A_n\}$的值，则相干态一定存在，且对应于 φ_α 的本征态$|\varphi_\alpha\rangle$也就知道了. 下面的任务就是求相应于给定的 φ_α 的$\{A_n\}$. 将 a_α 作用于$|\varphi\rangle$上，有

$$\begin{aligned} a_\alpha \mid \varphi\rangle &= a_\alpha \sum_n^\infty A_n \mid n\rangle_\alpha = \sum_n^\infty \sqrt{n} A_n \mid n-1\rangle_\alpha \\ &= \varphi_\alpha \sum_n^\infty A_n \mid n\rangle_\alpha \end{aligned} \tag{8.1.6}$$

比较上式两方的$|n-1\rangle_\alpha$ 的系数，得

$$A_n = \frac{\varphi_\alpha}{\sqrt{n}} A_{n-1}$$

按上式的关系推下去，有

$$A_n = \frac{\varphi_\alpha}{\sqrt{n}} A_{n-1} = \frac{\varphi_\alpha}{\sqrt{n}} \frac{\varphi_\alpha}{\sqrt{n-1}} A_{n-2} = \cdots = \frac{(\varphi_\alpha)^n}{\sqrt{n!}} A_0$$

如选定 $A_0=1$，即可得出所有的系数 A_n 的值为

$$A_n = \frac{(\varphi_\alpha)^n}{\sqrt{n!}} \tag{8.1.7}$$

推广到普遍情形是直接的，原因是将任意算符 a_{α_i} 作用到(8.1.3)式的$|\varphi\rangle$上时，其他的 n_{α_j} $(j\neq i)$都不改变，情形和上面的单一 a_α 时一样. 因此立即可以写出

$$A_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}\cdots} = \frac{\varphi_{\alpha_1}^{n_{\alpha_1}}}{\sqrt{n_{\alpha_1}!}} \frac{\varphi_{\alpha_2}^{n_{\alpha_2}}}{\sqrt{n_{\alpha_2}!}} \cdots \tag{8.1.8}$$

至此，$|\varphi\rangle$作为所有湮灭算符$\{a_{\alpha_i}\}$的本征态的系数 $A_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}\cdots}$ 的显式表达已得到，相干态的存在也因此得以证明.

下面再将相干态的形式改写一下. 因为态矢$|n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}\cdots n_{\alpha_p}\cdots\rangle$也可以表示为

$$\mid n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}\cdots n_{\alpha_p}\cdots\rangle = \frac{1}{\sqrt{\prod_i n_{\alpha_i}!}} (a_{\alpha_1}^+)^{n_{\alpha_1}} (a_{\alpha_2}^+)^{n_{\alpha_2}} \cdots (a_{\alpha_p}^+)^{n_{\alpha_p}} \cdots \mid 0\rangle \tag{8.1.9}$$

将上式及(8.1.8)式代入(8.1.3)中，有

$$\begin{aligned} \mid \varphi\rangle &= \sum_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}\cdots n_{\alpha_p}\cdots} \frac{(\varphi_{\alpha_1} a_{\alpha_1}^+)^{n_\alpha}}{n_{\alpha_1}!} \frac{(\varphi_{\alpha_2} a_{\alpha_2}^+)^{n_{\alpha_2}}}{n_{\alpha_2}!} \cdots \frac{(\varphi_{\alpha_p} a_{\alpha_p}^+)^{n_{\alpha_p}}}{n_{\alpha_p}!} \cdots \mid 0\rangle \\ &= e^{\sum_\alpha \varphi_\alpha a_\alpha^+} \mid 0\rangle \end{aligned} \tag{8.1.10}$$

上式是常用的相干态表示形式.

8.1.3 相干态的性质

(a) 由相干态的定义有

$$a_\alpha e^{\sum_\alpha \varphi_\alpha a_\alpha^+}|0\rangle = \varphi_\alpha e^{\sum_\alpha \varphi_\alpha a_\alpha^+}|0\rangle \tag{8.1.11}$$

取共轭得

$$\langle 0|e^{\sum_\alpha \varphi_\alpha^* a_\alpha} a_\alpha^+ = \langle 0|e^{\sum_\alpha \varphi_\alpha^* a_\alpha}\varphi_\alpha^* \tag{8.1.12}$$

(b) 将产生算符作用于相干态,得

$$a_\alpha^+ e^{\sum_\alpha \varphi_\alpha a_\alpha^+}|0\rangle = \frac{\partial}{\partial \varphi_\alpha} e^{\sum_\alpha \varphi_\alpha a_\alpha^+}|0\rangle \tag{8.1.13}$$

取共轭得

$$\langle 0|e^{\sum_\alpha \varphi_\alpha^* a_\alpha} a_\alpha = \frac{\partial}{\partial \varphi_\alpha^*}\langle 0|e^{\sum_\alpha \varphi_\alpha^* a_\alpha} \tag{8.1.14}$$

(c) 考虑两个相干态

$$|\varphi\rangle = \sum_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}\cdots n_{\alpha_p}\cdots} \frac{\varphi_{\alpha_1}^{n_{\alpha_1}}}{\sqrt{n_{\alpha_1}!}} \frac{\varphi_{\alpha_2}^{n_{\alpha_2}}}{\sqrt{n_{\alpha_2}!}} \cdots \frac{\varphi_{\alpha_p}^{n_{\alpha_p}}}{\sqrt{n_{\alpha_p}!}} \cdots |n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}\cdots n_{\alpha_p}\cdots\rangle$$

$$|\varphi'\rangle = \sum_{n'_{\alpha_1}, n'_{\alpha_2}\cdots n'_{\alpha_p}\cdots} \frac{\varphi_{\alpha_1}^{n'_{\alpha_1}}}{\sqrt{n'_{\alpha_1}!}} \frac{\varphi_{\alpha_2}^{n'_{\alpha_2}}}{\sqrt{n'_{\alpha_2}!}} \cdots \frac{\varphi_{\alpha_p}^{n'_{\alpha_p}}}{\sqrt{n'_{\alpha_p}!}} \cdots |n'_{\alpha_1}, n'_{\alpha_2}\cdots n'_{\alpha_p}\cdots\rangle$$

作它们的内积

$$\begin{aligned}
\langle\varphi|\varphi'\rangle = & \sum_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}\cdots n_{\alpha_p}\cdots} \sum_{n'_{\alpha_1}, n'_{\alpha_2}\cdots n'_{\alpha_p}\cdots} \frac{\varphi_{\alpha_1}^{*n_{\alpha}}}{\sqrt{n_{\alpha_1}!}} \frac{\varphi_{\alpha_2}^{*n_{\alpha_2}}}{\sqrt{n_{\alpha_2}!}} \cdots \frac{\varphi_{\alpha_p}^{*n_{\alpha_p}}}{\sqrt{n_{\alpha_p}!}} \cdots \\
& \langle n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}\cdots n_{\alpha_p}\cdots | n'_{\alpha_1}, n'_{\alpha_2}\cdots n'_{\alpha_p}\cdots\rangle \frac{\varphi_{\alpha_1}^{n'_{\alpha_1}}}{\sqrt{n'_{\alpha_1}!}} \frac{\varphi_{\alpha_2}^{n'_{\alpha_2}}}{\sqrt{n'_{\alpha_2}!}} \cdots \frac{\varphi_{\alpha_p}^{n'_{\alpha_p}}}{\sqrt{n'_{\alpha_p}!}} \cdots \\
= & \sum_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}\cdots n_{\alpha_p}\cdots} \sum_{n'_{\alpha_1}, n'_{\alpha_2}\cdots n'_{\alpha_p}\cdots} \frac{\varphi_{\alpha_1}^{*n_{\alpha_1}}}{\sqrt{n_{\alpha_1}!}} \cdots \frac{\varphi_{\alpha_p}^{*n_{\alpha_p}}}{\sqrt{n_{\alpha_p}!}} \cdots \frac{\varphi_{\alpha_1}^{n'_{\alpha_1}}}{\sqrt{n'_{\alpha_1}!}} \cdots \frac{\varphi_{\alpha_p}^{n'_{\alpha_p}}}{\sqrt{n'_{\alpha_p}!}} \cdots \\
& \times \delta_{n_{\alpha_1} n'_{\alpha_1}} \delta_{n_{\alpha_2} n'_{\alpha_2}} \cdots \delta_{n_{\alpha_p} n'_{\alpha_p}} \cdots \\
= & \sum_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}\cdots n_{\alpha_p}\cdots} \frac{(\varphi_{\alpha_1}^* \varphi'_{\alpha_1})^{n_{\alpha_1}}}{n_{\alpha_1}!} \cdots \frac{(\varphi_{\alpha_p}^* \varphi'_{\alpha_p})^{n_{\alpha_p}}}{n_{\alpha_p}!} \cdots = e^{\sum_\alpha \varphi_\alpha^* \varphi'_\alpha}
\end{aligned} \tag{8.1.15}$$

上式表明相干态空间里不同的相干态并不正交,它不像粒子数表象中不同粒子数的 Fock 态是正交的.

8.1.4 封闭关系

相干态间有类似于 Fock 态空间的封闭性关系

$$\int \prod_\alpha \frac{d\varphi_\alpha^* d\varphi_\alpha}{2\pi i} e^{-\sum_\alpha \varphi_\alpha^* \varphi_\alpha} |\varphi\rangle\langle\varphi| = 1 \tag{8.1.16}$$

为证明上述关系,下面分几步讨论.

(a) 先考虑积分测度问题. 可将对$\{\varphi_\alpha^*\}$及$\{\varphi_\alpha\}$的积分$\frac{\mathrm{d}\varphi_\alpha^*\mathrm{d}\varphi_\alpha}{2\pi\mathrm{i}}$换成对$\varphi_\alpha$的实部及虚部的积分,积分变换的 Jacobian 行列式为

$$J=\begin{vmatrix}\frac{\partial\varphi_\alpha^*}{\partial(\mathrm{Re}\,\varphi_\alpha)} & \frac{\partial\varphi_\alpha^*}{\partial(\mathrm{Im}\,\varphi_\alpha)}\\ \frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial(\mathrm{Re}\,\varphi_\alpha)} & \frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial(\mathrm{Im}\,\varphi_\alpha)}\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}1 & -\mathrm{i}\\ 1 & \mathrm{i}\end{vmatrix}=2\mathrm{i} \tag{8.1.17}$$

因此有

$$\int\prod_\alpha\frac{\mathrm{d}\varphi_\alpha^*\mathrm{d}\varphi_\alpha}{2\pi\mathrm{i}}\to\int\prod_\alpha\frac{\mathrm{d}(\mathrm{Re}\,\varphi_\alpha)\mathrm{d}(\mathrm{Im}\,\varphi_\alpha)}{\pi}$$

(b) 计算如下的对易式

$$\begin{aligned}[a_\alpha,|\varphi\rangle\langle\varphi|]&=a_\alpha|\varphi\rangle\langle\varphi|-|\varphi\rangle\langle\varphi|a_\alpha\\&=\varphi_\alpha|\varphi\rangle\langle\varphi|-\frac{\partial}{\partial\varphi_\alpha^*}|\varphi\rangle\langle\varphi|\\&=\left(\varphi_\alpha-\frac{\partial}{\partial\varphi_\alpha^*}\right)|\varphi\rangle\langle\varphi|\end{aligned} \tag{8.1.18}$$

上式第二等式后的结果利用了(8.1.11)及(8.1.14)式. 利用(8.1.18)式计算下面的对易式

$$\begin{aligned}&\left[a_\alpha,\int\prod_{\alpha'}\frac{\mathrm{d}\varphi_{\alpha'}^*\mathrm{d}\varphi_{\alpha'}}{2\pi\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\sum_{\alpha'}\varphi_{\alpha'}^*\varphi_{\alpha'}}|\varphi\rangle\langle\varphi|\right]\\&=\int\prod_{\alpha'}\frac{\mathrm{d}\varphi_{\alpha'}^*\mathrm{d}\varphi_{\alpha'}}{2\pi\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\sum_{\alpha'}\varphi_{\alpha'}^*\varphi_{\alpha'}}\left(\varphi_\alpha-\frac{\partial}{\partial\varphi_\alpha^*}\right)|\varphi\rangle\langle\varphi|\\&=\int\prod_{\alpha'}\frac{\mathrm{d}\varphi_{\alpha'}^*\mathrm{d}\varphi_{\alpha'}}{2\pi\mathrm{i}}\left[\left(\varphi_\alpha+\frac{\partial}{\partial\varphi_\alpha^*}\right)\mathrm{e}^{-\sum_{\alpha'}\varphi_{\alpha'}^*\varphi_{\alpha'}}\right]|\varphi\rangle\langle\varphi|\\&=0\end{aligned} \tag{8.1.19}$$

上式第二等式后的表示式是分部积分的结果.

(c) 在(8.1.19)式左方对易式中的第二个算符是自共轭算符,因此对(8.1.19)式的两端取共轭便得到如下的结果

$$\left[a_\alpha^+,\int\prod_{\alpha'}\frac{\mathrm{d}\varphi_{\alpha'}^*\mathrm{d}\varphi_{\alpha'}}{2\pi\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\sum_{\alpha'}\varphi_{\alpha'}^*\varphi_{\alpha'}}|\varphi\rangle\langle\varphi|\right]=0 \tag{8.1.20}$$

(8.1.19)及(8.1.20)式的意义是对易式中的第二个算符和所有的a_α,a_α^+都对易. 另一方面,我们知道系统所有的算符均由基本算符$\{a_\alpha\},\{a_\alpha^+\}$组成,因此该算符就与所有的算符都对易——它只可能是一个常量算符.

(d) 为了求出该常量算符的值,可以将它在任意一个物理态中去求期待值. 因为它是常数算符,期待值就是它的值. 由于真空态是最简单的态,所以我们就来求它在真空态中的期待值

$$\begin{aligned}
&\langle 0 \mid \int \prod_\alpha \frac{d\varphi_\alpha^* d\varphi_\alpha}{2\pi i} e^{-\sum_\alpha \varphi_\alpha^* \varphi_\alpha} \mid \varphi\rangle\langle\varphi \mid 0\rangle \\
&= \int \prod_\alpha \frac{d\varphi_\alpha^* d\varphi_\alpha}{2\pi i} e^{-\sum_\alpha \varphi_\alpha^* \varphi_\alpha} \langle 0 \mid \varphi\rangle\langle\varphi \mid 0\rangle \\
&= \int \prod_\alpha \frac{d\varphi_\alpha^* d\varphi_\alpha}{2\pi i} e^{-\sum_\alpha \varphi_\alpha^* \varphi_\alpha} \\
&= \int \prod_\alpha \frac{d(\mathrm{Re}\ \varphi_\alpha) d(\mathrm{Im}\ \varphi_\alpha)}{\pi} e^{-\sum_\alpha [(\mathrm{Re}\ \varphi_\alpha)^2 + (\mathrm{Im}\ \varphi_\alpha)^2]} \\
&= \prod_\alpha \frac{1}{\pi} (\sqrt{\pi})(\sqrt{\pi}) = 1
\end{aligned} \tag{8.1.21}$$

其中用到了如下的关系

$$\begin{aligned}
\langle 0 \mid \varphi\rangle &= \langle 0 \mid e^{\sum_\alpha \varphi_\alpha a_\alpha^+} \mid 0\rangle \\
&= \langle 0 \mid 0\rangle + \langle 0 \mid \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\sum_\alpha \varphi_\alpha a_\alpha^+\right)^n \mid 0\rangle \\
&= \langle 0 \mid 0\rangle = 1
\end{aligned} \tag{8.1.22}$$

至此我们便完成了对(8.1.16)式表示的封闭性的证明.

8.1.5 封闭关系的应用

(a) 记一个算符 $\hat{A}$ 的迹为 Tr $\hat{A}$. 设 $\{|n\rangle\}$ 是 Fock 空间里的一组完备的态矢,即

$$\sum_n \mid n\rangle\langle n \mid = 1$$

则 $\hat{A}$ 的迹定义为

$$\mathrm{Tr}\ \hat{A} \equiv \sum_n \langle n \mid \hat{A} \mid n\rangle \tag{8.1.23}$$

其物理意义是该算符在完备态矢集中的期待值之和. 算符 $\hat{A}$ 的迹是一个和完备态矢集无关的数值. 证明如下:

设 $\{|n\rangle\}$ 和 $\{|m\rangle\}$ 是两个不同的完备态矢集,则

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\ \hat{A} &= \sum_n \langle n \mid \hat{A} \mid n\rangle = \sum_{n,m} \langle n \mid \hat{A} \mid m\rangle\langle m \mid n\rangle \\
&= \sum_{n,m} \langle m \mid n\rangle\langle n \mid \hat{A} \mid m\rangle = \sum_m \langle m \mid \hat{A} \mid m\rangle
\end{aligned}$$

(b) 利用封闭性关系写出算符的迹的相干态表示

$$\mathrm{Tr}\ \hat{A} = \sum_n \langle n \mid \hat{A} \mid n\rangle = \sum_n \langle n \mid \int \prod_\alpha \frac{d\varphi_\alpha^* d\varphi_\alpha}{2\pi i} e^{-\sum_\alpha \varphi_\alpha^* \varphi_\alpha} \mid \varphi\rangle\langle\varphi \mid \hat{A} \mid n\rangle$$

$$= \sum_n \int \prod_\alpha \frac{d\varphi_\alpha^* d\varphi_\alpha}{2\pi i} e^{-\sum_\alpha \varphi_\alpha^* \varphi_\alpha} \langle \varphi \mid \hat{A} \mid n \rangle \langle n \mid \varphi \rangle$$

$$= \int \prod_\alpha \frac{d\varphi_\alpha^* d\varphi_\alpha}{2\pi i} e^{-\sum_\alpha \varphi_\alpha^* \varphi_\alpha} \langle \varphi \mid \hat{A} \mid \varphi \rangle \tag{8.1.24}$$

(c) 如同任何态矢可用一组完备的态矢集展开一样，利用封闭性关系也可以将该态矢用相干态矢集展开

$$\begin{aligned} \mid \psi \rangle &= \int \prod_\alpha \frac{d\varphi_\alpha^* d\varphi_\alpha}{2\pi i} e^{-\sum_\alpha \varphi_\alpha^* \varphi_\alpha} \mid \varphi \rangle \langle \varphi \mid \psi \rangle \\ &= \int \prod_\alpha \frac{d\varphi_\alpha^* d\varphi_\alpha}{2\pi i} e^{-\sum_\alpha \varphi_\alpha^* \varphi_\alpha} \psi(\varphi^*) \mid \varphi \rangle \end{aligned} \tag{8.1.25}$$

现在把上面的展开式同一个粒子的任意态矢在完备的位置态矢集上的展开式

$$\mid \psi \rangle = \int \mid \boldsymbol{x} \rangle \langle \boldsymbol{x} \mid d\boldsymbol{x} \mid \psi \rangle = \int d\boldsymbol{x} \psi(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{x} \rangle \tag{8.1.26}$$

作一比较. 由于在量子理论中将 $\psi(\boldsymbol{x})$ 叫做 $|\psi\rangle$ 在位置表象中的波函数，则由 (8.1.25)式，$\langle\varphi|\psi\rangle$ 可叫做 $|\psi\rangle$ 在相干态表象中的波函数.

(d) 算符对相干态波函数的作用. 为了清楚地说明这个问题的意义，还是用态矢在位置表象中的波函数来作一类比. 一个态矢 $|\psi\rangle$，描述一个粒子系统的一个物理状态，这个物理状态也可以用相应的波函数 $\psi(\boldsymbol{x})$ 来描述. 此外，一个算符作用到一个态矢上会把它转化为一个新的态矢. 例如，用 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 算符作用到态矢 $|\psi\rangle$ 上有

$$\begin{aligned} \hat{x} \mid \psi \rangle &= \mid \psi_1 \rangle \\ \hat{p} \mid \psi \rangle &= \mid \psi_2 \rangle \end{aligned} \tag{8.1.27}$$

我们会问新的 $|\psi_1\rangle$，$|\psi_2\rangle$ 对应的波函数 $\psi_1(\hat{x})$ 及 $\psi_2(\hat{x})$ 与原来的 $\psi(\hat{x})$ 有什么关系？其实这个关系是我们熟知的，即

$$\begin{aligned} \psi_1(\hat{x}) &= \langle \boldsymbol{x} \mid \psi_1 \rangle = \langle \boldsymbol{x} \mid \hat{x} \mid \psi \rangle = x \langle \boldsymbol{x} \mid \psi \rangle = x\psi(\boldsymbol{x}) \\ \psi_2(\hat{x}) &= \langle \boldsymbol{x} \mid \psi_2 \rangle = \langle \boldsymbol{x} \mid \hat{p}_x \mid \psi \rangle = \langle \boldsymbol{x} \mid \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \mid \psi \rangle \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle \boldsymbol{x} \mid \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\boldsymbol{x}) \end{aligned} \tag{8.1.28}$$

(8.1.28)式告诉我们，算符 $\hat{x}$ 及 $\hat{p}_x$ 对波函数 $\psi(\boldsymbol{x})$ 作用产生的新波函数为

$$\begin{aligned} \hat{x}\psi(\hat{x}) &= x\psi(\hat{x}) \\ \hat{p}_x\psi(\hat{x}) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\hat{x}) \end{aligned} \tag{8.1.29}$$

有了这样的类比后，我们就清楚下面要讨论的是：如果一个物理状态对应的态矢是 $|\psi\rangle$ 且它在相干态表象中的波函数是 $\psi(\varphi^*)$，那么一个算符作用到这一波函数上会得到什么样的波函数呢？由于任意的算符总是由基本算符 a_α 及 a_α^+ 所构成，因此只要讨论它们对相干态波函数的作用就可以了. 于是问题就归结为问 $a_\alpha|\psi\rangle$ 及

$a_\alpha^+|\psi\rangle$对应的相干态波函数为何. 利用(8.1.12)及(8.1.14)式,有

$$\psi_1(\varphi^*)=\langle\varphi\mid a_\alpha\mid\psi\rangle=\langle\varphi\mid\frac{\partial}{\partial\varphi_\alpha^*}\mid\psi\rangle$$

$$=\frac{\partial}{\partial\varphi_\alpha^*}\langle\varphi\mid\psi\rangle=\frac{\partial}{\partial\varphi_\alpha^*}\psi(\varphi_\alpha^*)\tag{8.1.30}$$

$$\psi_2(\varphi^*)=\langle\varphi\mid a_\alpha^+\mid\psi\rangle=\langle\varphi\mid\varphi_\alpha^*\mid\psi\rangle$$

$$=\varphi_\alpha^*\langle\varphi\mid\psi\rangle=\varphi_\alpha^*\psi(\varphi_\alpha^*)\tag{8.1.31}$$

可见,与位置表象中 $\hat{x},\hat{p}_x$ 算符对波函数的作用为

$$\hat{x}\rightarrow x\quad\hat{p}_x\rightarrow\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\tag{8.1.32}$$

的代换关系类似,在相干态表象中有如下的代换关系

$$a_\alpha\rightarrow\frac{\partial}{\partial\varphi_\alpha^*}\quad a_\alpha^+\rightarrow\varphi_\alpha^*\tag{8.1.33}$$

(e) 定态方程. 一个物理系统的哈密顿量也是由基本算符集合$\{a_\alpha^+\}$及$\{a_\alpha\}$构成的,它的定态方程为

$$\hat{H}(\{a_\alpha^+\},\{a_\alpha\})\mid\psi\rangle=E\mid\psi\rangle\tag{8.1.34}$$

该定态方程如果在相干态表象中写出,则有

$$\hat{H}(\{a_\alpha^+\},\{a_\alpha\})\psi(\varphi^*)=E\psi(\varphi^*)\tag{8.1.35}$$

例如,在多体系统中常见的多体系统哈密顿量为动能加上粒子之间的相互作用

$$H=\sum_{\alpha,\beta}T_{\alpha,\beta}a_\alpha^+a_\beta+\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta}\langle\alpha\beta\mid\nu\mid\gamma\delta\rangle a_\alpha^+a_\beta^+a_\delta a_\gamma\tag{8.1.36}$$

因此,它的定态方程在相干态表象中就可写成

$$\left[\sum_{\alpha,\beta}T_{\alpha,\beta}\varphi_\alpha^*\frac{\partial}{\partial\varphi_\beta^*}+\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta}\langle\alpha\beta\mid\nu\mid\gamma\delta\rangle\varphi_\alpha^*\varphi_\beta^*\frac{\partial}{\partial\varphi_\gamma^*}\frac{\partial}{\partial\varphi_\delta^*}\right]\psi(\varphi^*)$$

$$=E\psi(\varphi^*)\tag{8.1.37}$$

(f) 一个例子——Polariton 模型. Polariton 是入射到固体中的光子与声子结合形成的复合体. 这里考虑最简单的 Polariton 系统,即单模光子和单模声子耦合的系统. 记 a,a^+ 是光子的湮灭和产生算符,b,b^+ 是声子的湮灭和产生算符,ω_a 是光子的能量($\hbar=1$),ω_b 是声子的能量,χ是两者相互作用的耦合常数. 这一耦合系统的哈密顿量为

$$H=\omega_a a^+a+\omega_b b^+b+\chi(a^+b^++ab+a^+b+b^+a)$$

现在在相干态表象中写出这一系统的定态方程

$$\left[\omega_a\varphi_a^*\frac{\partial}{\partial\varphi_a^*}+\omega_b\varphi_b^*\frac{\partial}{\partial\varphi_b^*}+\chi\left(\varphi_a^*\varphi_b^*+\frac{\partial}{\partial\varphi_a^*}\frac{\partial}{\partial\varphi_b^*}+\varphi_a^*\frac{\partial}{\partial\varphi_b^*}+\varphi_b^*\frac{\partial}{\partial\varphi_a^*}\right)\right]\psi(\varphi_a^*,\varphi_b^*)$$

$$=E\psi(\varphi_a^*,\varphi_b^*)\tag{8.1.38}$$

根据以上的方程形式可以尝试将其基态解写成

$$\psi(\varphi_a^*,\varphi_b^*)=e^{\alpha\varphi_a^*\varphi_a^*+\beta\varphi_b^*\varphi_b^*+\gamma\varphi_a^*\varphi_b^*} \tag{8.1.39}$$

将(8.1.39)式代入(8.1.38)式,得

$$\begin{aligned}&2\omega_a\alpha\varphi_a^*\varphi_a^*\psi+\omega_a\gamma\varphi_a^*\varphi_b^*\psi+2\omega_b\beta\varphi_b^*\varphi_b^*\psi+\omega_b\gamma\varphi_a^*\varphi_b^*\psi\\&+\chi\varphi_a^*\varphi_b^*\psi+2\chi\beta\varphi_a^*\varphi_b^*\psi+\chi\gamma\varphi_a^*\varphi_a^*\psi+2\chi\alpha\varphi_a^*\varphi_b^*\psi+\chi\gamma\varphi_b^*\varphi_b^*\psi\\&+\chi\gamma\psi+4\chi\alpha\beta\varphi_a^*\varphi_b^*\psi+2\chi\alpha\gamma\varphi_a^*\varphi_a^*\psi+2\chi\beta\gamma\varphi_b^*\varphi_b^*\psi+\chi\gamma^2\varphi_a^*\varphi_b^*\psi\\&=E\psi\end{aligned} \tag{8.1.40}$$

比较上式两方的 $\varphi_a^*\varphi_a^*\psi,\varphi_b^*\varphi_b^*\psi,\varphi_a^*\varphi_b^*\psi$ 及 ψ 的系数,得

$$2\omega_a\alpha+\chi\gamma+2\chi\alpha\gamma=0 \tag{8.1.41}$$

$$2\omega_b\beta+\chi\gamma+2\chi\beta\gamma=0 \tag{8.1.42}$$

$$\omega_a\gamma+\omega_b\gamma+\chi+2\chi\alpha+2\chi\beta+\chi(4\alpha\beta+\gamma^2)=0 \tag{8.1.43}$$

$$\chi\gamma=E \tag{8.1.44}$$

由(8.1.41)及(8.1.42)式给出

$$\alpha=-\frac{E}{2(E+\omega_a)} \tag{8.1.45}$$

$$\beta=-\frac{E}{2(E+\omega_b)} \tag{8.1.46}$$

由(8.1.43)式给出

$$(\omega_a+\omega_b)E+E^2+\chi^2(1+2\alpha+2\beta+4\alpha\beta)=0 \tag{8.1.47a}$$

即

$$E^2+(\omega_a+\omega_b)E+\chi^2\left[\frac{(E+\omega_a)(E+\omega_b)-\frac{1}{2}E(\omega_a+E)-\frac{1}{2}E(\omega_b+E)+E^2}{(\omega_a+E)(\omega_b+E)}\right]=0$$

$$\begin{aligned}&(E+\omega_a)(E+\omega_b)[(E+\omega_a)(E+\omega_b)-\omega_a\omega_b]\\&\quad+\chi^2\left[E^2+\frac{1}{2}(\omega_a+\omega_b)+\omega_a\omega_b\right]=0\end{aligned} \tag{8.1.47b}$$

剩下的就是解上面的 E 的四次方程了. 这里附带提一点,从(8.1.38)式可以看出系统的哈密顿量是算符的二次型,原则上可以通过正则变换使之对角化. 这种方法的好处是一旦实现了对角化,所有的能态和态矢都可得到,但困难的是变换很复杂,特别是当模式数很多时几乎无法解决. 用相干态表象中的定态方程推广到多模情形除更复杂外,原则上一样是可行的.

8.1.6 相干态与 Fock 态的比较

(a) 相干态明显地不是粒子数一定的 Fock 态，即它不是粒子数算符 $\hat{n}_\alpha = a_\alpha^+ a_\alpha$ 的本征态，但总可以问算符 $\hat{n}_\alpha$ 在相干态中的期待值 $\bar{n}_\alpha$ 为何？这可计算如下

$$\bar{n}_\alpha = \frac{\langle \varphi \mid \hat{n}_\alpha \mid \varphi \rangle}{\langle \varphi \mid \varphi \rangle} = \frac{\langle \varphi \mid a_\alpha^+ a_\alpha \mid \varphi \rangle}{\langle \varphi \mid \varphi \rangle}$$

$$= \frac{\varphi_\alpha^* \varphi_\alpha \langle \varphi \mid \varphi \rangle}{\langle \varphi \mid \varphi \rangle} = |\varphi_\alpha|^2 \tag{8.1.48}$$

上式的结果直接告诉我们，相干态中参量 φ_α 的模平方就是相干态中 α 模的平均粒子数，这也就是相干态中参量 φ_α 的物理意义.

(b) 还可以从另一角度来看相干态在 Fock 态 $|n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \cdots\rangle$ 上的投影 $\langle n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \cdots | \varphi\rangle$. 取其模的平方，得

$$|\langle n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \cdots \mid \varphi \rangle|^2 = \prod_\alpha \frac{|\varphi_\alpha|^{2n_\alpha}}{n_\alpha!} \tag{8.1.49}$$

上式的结果不仅告诉我们相干态中包含 Fock 态 $|n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \cdots\rangle$ 的几率是多少，同时也告诉我们相干态包含了各种粒子数一定的 Fock 态，因为它们的几率都不为零.

(c) 总粒子数算符是 $\hat{N} = \sum_\alpha a_\alpha^+ a_\alpha$，因此相干态的平均总粒子数为

$$\bar{N} = \frac{\langle \varphi \mid \hat{N} \mid \varphi \rangle}{\langle \varphi \mid \varphi \rangle} = \frac{\sum_\alpha \langle \varphi \mid a_\alpha^+ a_\alpha \mid \varphi \rangle}{\langle \varphi \mid \varphi \rangle}$$

$$= \sum_\alpha \varphi_\alpha^* \varphi_\alpha \tag{8.1.50}$$

(d) 因为相干态不是总粒子数算符的本征态，它含有各种总粒子数的态，所以我们可以计算出总粒子数的涨落

$$\sigma^2 = \overline{(N)^2} - (\bar{N})^2 = \frac{\langle \varphi \mid \hat{N}^2 \mid \varphi \rangle}{\langle \varphi \mid \varphi \rangle} - (\bar{N})^2$$

$$= \frac{\langle \varphi \mid (\sum_\alpha a_\alpha^+ a_\alpha)(\sum_\beta a_\beta^+ a_\beta) \mid \varphi \rangle}{\langle \varphi \mid \varphi \rangle} - (\bar{N})^2$$

$$= \frac{\langle \varphi \mid \sum_{\alpha\beta} a_\alpha^+ (\delta_{\alpha\beta} + a_\beta^+ a_\alpha) a_\beta \mid \varphi \rangle}{\langle \varphi \mid \varphi \rangle} - (\bar{N})^2$$

$$= \frac{\langle \varphi \mid (\sum_{\alpha\beta} a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\alpha a_\beta + \sum_\alpha a_\alpha^+ a_\alpha) \mid \varphi \rangle}{\langle \varphi \mid \varphi \rangle} - (\bar{N})^2$$

$$= (\bar{N})^2 + \bar{N} - (\bar{N})^2 = \bar{N}$$

由上式可得

$$\frac{\sigma}{\bar{N}} = \frac{(\bar{N})^{\frac{1}{2}}}{\bar{N}} = \frac{1}{\sqrt{\bar{N}}} \tag{8.1.51}$$

上式的物理意义是：$\bar{N}$ 越大，相干态围绕其平均总粒子数的涨落越小. 换句话说，从统计的角度，当 $\bar{N}$ 很大时相干态的性质将接近总粒子数一定的 Fock 态. 两者的差异随着 $\bar{N}$ 增大而越来越小.

8.1.7 相干态的优点

如前所述，在求解一个问题时既可以在粒子数表象中讨论，也可以在相干态表象中讨论，视问题的不同选择恰当的表象肯定会更加便捷一些. 下面谈谈哪些地方体现出相干态的优点.

(a) 物理上习惯把所有的算符通过对易关系都写成正规乘积的形式. 一个算符的正规乘积：$\hat{A}(\{a_\alpha^+\},\{a_\alpha\})$：定义为经过对易操作后所有产生算符都排在左方而湮灭算符都排在右方的形式. 求算符的正规乘积在相干态中的矩阵元就特别方便，因为利用相干态的性质

$$\langle\varphi \mid a_\alpha^+ = \langle\varphi \mid \varphi_\alpha^*, \quad a_\alpha \mid \varphi\rangle = \varphi_\alpha \mid \varphi\rangle$$

就立即能写出其矩阵元来

$$\begin{aligned}\langle\varphi \mid :\hat{A}(\{a_\alpha^+\},\{a_\alpha\}): \mid \varphi'\rangle &= A(\{\varphi_\alpha^*\},\{\varphi_\alpha\})\langle\varphi \mid \varphi'\rangle \\ &= A(\{\varphi_\alpha^*\},\{\varphi_\alpha\})\mathrm{e}^{\sum_\alpha \varphi_\alpha^* \varphi_\alpha}\end{aligned} \tag{8.1.52}$$

例如，相互作用能就是表示为正规乘积的形式，它的矩阵元可表示为

$$\begin{aligned}\langle\varphi \mid \hat{V} \mid \varphi'\rangle &= \frac{1}{2}\sum_{\lambda,\mu,\gamma,\rho}\langle\lambda\mu \mid \nu \mid \gamma\rho\rangle\langle\varphi \mid a_\lambda^+ a_\mu^+ a_\rho a_\gamma \mid \varphi'\rangle \\ &= \frac{1}{2}\sum_{\lambda,\mu,\gamma,\rho}\langle\lambda\mu \mid \nu \mid \gamma\rho\rangle\varphi_\lambda^*\varphi_\mu^*\varphi'_\rho\varphi'_\gamma \mathrm{e}^{\sum_\alpha \varphi_\alpha^* \varphi'_\alpha}\end{aligned} \tag{8.1.53}$$

(b) 从模算符和相位算符也能看出相干态表示的优点.

(i) 从复数的性质得到的启发，设 z, z^* 是一对互为共轭的复数，有

$$|z|^2 = z \cdot z^* \quad 及 \quad z = (z \cdot z^*)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$$

即是说可以把一对复数 z, z^* 换为一对实数(ρ,φ)来描绘. 其中 $\rho=(z\cdot z^*)^{\frac{1}{2}}$ 是复数的模，φ 是位相. 考虑到湮灭算符 a 和产生算符 a^+ 是互为共轭的一对算符，那么是否也可以引入一对模算符和相位算符来代替它们呢？答案是肯定的.

下面定义一对自共轭的(对应于实数)模算符 $\hat{\rho}$ 及相位算符 $\hat{\varphi}$，它们和 a 及 a^+ 的关系为

$$a = \hat{\rho}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{\varphi}}$$

并可导出

$$a^+ = (\hat{\rho}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{\varphi}})^+ = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\varphi}^+}\hat{\rho}^+ = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\varphi}}\hat{\rho} \tag{8.1.54}$$

在上式的最后一个等式中用到了 $\hat{\rho}^+=\hat{\rho}$ 以及 $\hat{\varphi}^+=\hat{\varphi}$.

(ii) $\hat{\rho}$ 和 $\hat{\varphi}$ 有以下的一些性质. 从基本对易式出发

$$1=[a,a^+]=aa^+-a^+a=\hat{\rho}e^{i\hat{\varphi}}e^{-i\hat{\varphi}}\hat{\rho}-\hat{n}=\hat{\rho}^2-\hat{n}=1$$

于是有

$$\hat{\rho}^2=\hat{n}+1 \tag{8.1.55a}$$

或

$$\hat{\rho}=(\hat{n}+1)^{\frac{1}{2}} \tag{8.1.55b}$$

由此可见,模算符的平方和数算符差一个单位算符,或者是模算符等于数算符与单位算符之和开方. 这个结果也告诉我们直接用模算符和相位算符讨论问题时会因为其中的算符开方而带来一些不便.

有了(8.1.55a)式可以把 a,a^+ 写成

$$a=(\hat{n}+1)^{\frac{1}{2}}e^{i\hat{\varphi}},\quad a^+=e^{-i\hat{\varphi}}(\hat{n}+1)^{\frac{1}{2}}$$

再代入基本对易式

$$\begin{aligned}1&=[a,a^+]=aa^+-a^+a\\&=(\hat{n}+1)^{\frac{1}{2}}e^{i\hat{\varphi}}e^{-i\hat{\varphi}}(\hat{n}+1)^{\frac{1}{2}}-e^{-i\hat{\varphi}}(\hat{n}+1)^{\frac{1}{2}}(\hat{n}+1)^{\frac{1}{2}}e^{i\hat{\varphi}}\\&=(\hat{n}+1)-e^{-i\hat{\varphi}}(\hat{n}+1)e^{i\hat{\varphi}}=(\hat{n}+1)-e^{-i\hat{\varphi}}\hat{n}e^{i\hat{\varphi}}-1\end{aligned}$$

上式可写成

$$\hat{n}-e^{-i\hat{\varphi}}\hat{n}e^{i\hat{\varphi}}=1$$

将上式两端左乘 $e^{i\hat{\varphi}}$和右乘 $e^{-i\hat{\varphi}}$分别得到

$$\begin{cases}e^{i\hat{\varphi}}\hat{n}-\hat{n}e^{i\hat{\varphi}}=e^{i\hat{\varphi}}\\\hat{n}e^{-i\hat{\varphi}}-e^{-i\hat{\varphi}}\hat{n}=e^{-i\hat{\varphi}}\end{cases}$$

把它们改写成对易式的形式为

$$\begin{cases}[\hat{n},e^{i\hat{\varphi}}]=-e^{i\hat{\varphi}}\\[\hat{n},e^{-i\hat{\varphi}}]=e^{-i\hat{\varphi}}\end{cases} \tag{8.1.56}$$

如果把 $e^{\pm i\hat{\varphi}}$写成

$$e^{\pm i\hat{\varphi}}=\cos\hat{\varphi}\pm i\sin\hat{\varphi}$$

则(8.1.56)式可改写成

$$\begin{cases}[\hat{n},\cos\hat{\varphi}]=-i\sin\hat{\varphi}\\[\hat{n},\sin\hat{\varphi}]=i\cos\hat{\varphi}\end{cases} \tag{8.1.57}$$

现在看算符 $\cos\hat{\varphi}$ 和 $\sin\hat{\varphi}$ 在粒子数一定的 Fock 态 $|n\rangle$ 中的期待值.

$$\langle n\mid\cos\hat{\varphi}\mid n\rangle=-i\langle n\mid[\hat{n},\sin\hat{\varphi}]\mid n\rangle=-i\langle n\mid[\hat{n}\sin\hat{\varphi}-\sin\hat{\varphi}\hat{n}]\mid n\rangle=0 \tag{8.1.58}$$

类似地有

$$\langle n \mid \sin\hat{\varphi} \mid n\rangle = 0 \tag{8.1.59}$$

(8.1.58)以及(8.1.59)式告诉我们，在$|n\rangle$的态矢中粒子数是完全确定的，但是它的相位是完全不确定的. 说得更确切一点是其 $\cos\hat{\varphi}$ 及 $\sin\hat{\varphi}$ 的各种取值的几率都有，相消为零，即粒子数确定的态，其相位完全不定.

(iii) 用模算符和相位算符讨论可以得到一个重要的结论. 在讨论电磁场的量子化理论时，场算符可以展开成如下的形式(以电场为例，只取其中一个模)

$$\hat{E} \sim a\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + a^{+}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

现在分别看电场算符在粒子数一定的 Fock 态$|n\rangle$中的期待值及在该模式对应的单模相干态中的期待值.

$$\begin{aligned}\langle n \mid a\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \mid n\rangle &= \langle n \mid \hat{\rho}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{\varphi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \mid n\rangle = \langle n \mid (\hat{n}+1)^{\frac{1}{2}}(\cos\hat{\varphi}+\mathrm{i}\sin\hat{\varphi}) \mid n\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \\ &= (n+1)^{\frac{1}{2}}\langle n \mid (\cos\hat{\varphi}+\mathrm{i}\sin\hat{\varphi}) \mid n\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = 0\end{aligned}$$

同样地，有

$$\langle n \mid a^{+}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \mid n\rangle = 0$$

其实$\langle n|a|n\rangle=\langle n|a^{+}|n\rangle=0$ 的结果在前面谈到 a, a^{+} 的意义时已得到过. 这里再一次用模及相位算符来讨论使我们更进一步认识到这是相位完全不确定的结果. 下面看电场算符在相应模式的单模相干态中的期待值.

$$\begin{aligned}\langle\varphi \mid a\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \mid \varphi\rangle &= \varphi\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\langle\varphi \mid \varphi\rangle = \varphi\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \neq 0 \\ \langle\varphi \mid a^{+}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \mid \varphi\rangle &= \varphi^{*}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \neq 0\end{aligned}$$

得到了不为零的结果可以引出一个重要的结论，即电磁场不为零的状态是相干态而不是粒子数一定的态. 这点充分说明了在讨论物质与场作用时相干态的重要性.

8.2 费米系统的相干态

8.2.1 Grassmann 代数

为讨论费米系统的相干态作准备，需要先简明地讨论一下 Grassmann 代数. 如对费米系统也引入相干态，即

$$a_{\alpha} \mid \varphi\rangle = \varphi_{\alpha} \mid \varphi\rangle$$

那么就会有如下的结果

$$\begin{aligned}a_{\alpha}a_{\beta} \mid \varphi\rangle &= \varphi_{\alpha}\varphi_{\beta} \mid \varphi\rangle \\ a_{\beta}a_{\alpha} \mid \varphi\rangle &= \varphi_{\beta}\varphi_{\alpha} \mid \varphi\rangle\end{aligned}$$

将上面两式相加，有

$$(\varphi_{\alpha}\varphi_{\beta}+\varphi_{\beta}\varphi_{\alpha}) \mid \varphi\rangle = (a_{\alpha}a_{\beta}+a_{\beta}a_{\alpha}) \mid \varphi\rangle = [a_{\alpha}, a_{\beta}]_{+} \mid \varphi\rangle = 0$$

这是因为费米算符有基本的反对易式$[a_{\alpha}, a_{\beta}]_{+}=0$. 在上式中由于右方为 0 要

求左方也为 0，所以应有

$$\varphi_\alpha\varphi_\beta + \varphi_\beta\varphi_\alpha = 0$$

上式的结果告诉我们，与玻色系统很不相同，费米系统相干态的本征值不是普通的数，而是一种满足反对易关系的 G 数. 因此要对 G 数的性质作一些讨论后才能讨论费米相干态.

(a) 假定共有 n 个 G 数的生成元 $\{\xi_\alpha\}$，$\alpha=1,2,\cdots,n$，它们之间应是相互反对易的

$$\xi_\alpha\xi_\beta + \xi_\beta\xi_\alpha = 0 \tag{8.2.1}$$

在 $\alpha=\beta$ 的特殊情形下上式成为

$$\xi_\alpha^2 = 0 \tag{8.2.2}$$

即任何生成元的自乘为零.

(b) 为了以后讨论方便，将生成元写成

$$\xi_{\alpha_1}, \xi_{\alpha_2}, \cdots, \xi_{\alpha_n}$$

并假定已将下标排序 $\alpha_1<\alpha_2<\cdots<\alpha_n$，那么由这些生成元能生成多少个独立的基？为回答这一问题我们可以根据以下的两个原则来考虑.

(i) 任意一个基只要含某一个生成元的平方或以上的幂一定为零.

(ii) 基也包含普通的数. 普通的数只有一个生成元，那就是 1.

因此形成的基可排列如下：

$$\begin{aligned}
&1\\
&\xi_{\alpha_1}, \xi_{\alpha_2}, \cdots, \xi_{\alpha_n}\\
&\xi_{\alpha_1}\xi_{\alpha_2}, \xi_{\alpha_1}\xi_{\alpha_3}, \cdots, \xi_{\alpha_1}\xi_{\alpha_n}, \xi_{\alpha_2}\xi_{\alpha_3}, \cdots, \xi_{\alpha_2}\xi_{\alpha_n}, \cdots, \xi_{\alpha_{n-1}}\xi_{\alpha_n}\\
&\xi_{\alpha_1}\xi_{\alpha_2}\xi_{\alpha_3}, \xi_{\alpha_1}\xi_{\alpha_3}\xi_{\alpha_4}, \cdots\\
&\cdots\\
&\xi_{\alpha_1}\xi_{\alpha_2}\cdots\xi_{\alpha_n}
\end{aligned}$$

由上面排列的基的表示可知，基的总数为 2^n，这是因为所有的基均可写成 $(\xi_{\alpha_1})^{n_{\alpha_1}}(\xi_{\alpha_2})^{n_{\alpha_2}}\cdots(\xi_{\alpha_n})^{n_{\alpha_n}}$ 的形式，$n_{\alpha_i}=0,1$ 两个值，所以共有 2^n 个不同的基. 集合中的任一元素都是这 2^n 个基的线性组合.

(c) Grassmann 数还有下面的共轭关系. 如 $n=2p$，可任选其中 p 个定为 $\{\xi_\alpha\}$，其余 p 个指定与 $\{\xi_\alpha\}$ 形成一对一的关系. 记为它们的共轭 $\{\xi_\alpha^*\}$，即

$$(\xi_\alpha)^* \equiv \xi_\alpha^*$$

因此自然也有

$$(\xi_\alpha^*)^* \equiv \xi_\alpha$$

推论 1：ξ_α 乘普通数 λ 后为 $\lambda\xi_\alpha$. 它的共轭定义为

$$(\lambda\xi_\alpha)^* = \lambda^*\xi_\alpha^*$$

因此有

$$((\lambda\xi_\alpha)^*)^* = \lambda\xi_\alpha$$

推论 2：由于 G 数有和算符及矩阵类似的次序不能随意变动的性质，所以类似于乘积的共轭的定义，定义生成元乘积的共轭为

$$(\xi_{\alpha_1},\cdots,\xi_{\alpha_n})^* = \xi_{\alpha_n}^*\xi_{\alpha_{n-1}}^*\cdots\xi_{\alpha_1}^*$$

(d) 为了简便起见，以下只讨论一对生成元(ξ,ξ^*)的情形，讨论的结果可直接推广于多对(ξ_α,ξ_α^*)的模型. 一对生成元将生成四个基：$1,\xi,\xi^*,\xi^*\xi$. 因此它们的所有的函数形式均可写为以下两种形式

$$f(\xi) = f_0 + f_1\xi$$

$$A(\xi^*,\xi) = a_0 + a_1\xi + \overline{a_1}\xi^* + a_{12}\xi^*\xi$$

上两式中除生成元 ξ,ξ^* 外，其余的都是普通的数.

(e) 如何引入 G 数的"微分"运算. 首先要强调的是，由于 G 数和普通数不同，所以这里引入的"微分"没有普通数的差分极限的意义，即不是

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}$$

G 数的微分运算是按以下的考虑来定义的.

(i) 微分的形式写法相同.

(ii) 虽没有普通微分的差分极限的意义，但其运算规则相同. 确切一点说，就是按照普通数的微分运算规则

$$\begin{cases}\dfrac{\partial}{\partial\xi}\xi = 1\\[2mm] \dfrac{\partial}{\partial\xi}(a) = 0\end{cases} \tag{8.2.3}$$

来定义它的微分运算，其中 a 是普通数.

相应地，乘积的微分法为

$$\frac{\partial}{\partial\xi}(\xi^*\xi) = \frac{\partial}{\partial\xi}(-\xi\xi^*) = -\xi^* \tag{8.2.4}$$

注意，由于 G 数的次序不能随意变动，所以微分运算规定被微分的变量一定要紧靠微分运算时才能执行.

例如，函数的微分运算

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\xi}A(\xi^*,\xi) &= \frac{\partial}{\partial\xi}(a_0 + a_1\xi + \overline{a_1}\xi^* + a_{12}\xi^*\xi)\\ &= 0 + a_1 + 0 - a_{12}\frac{\partial}{\partial\xi}(\xi\xi^*)\\ &= a_1 - a_{12}\xi^*\end{aligned} \tag{8.2.5}$$

$$\frac{\partial}{\partial\xi^*}A(\xi^*,\xi) = 0 + 0 + \overline{a_1} + a_{12}\frac{\partial}{\partial\xi^*}(\xi^*\xi) = \overline{a_1} + a_{12}\xi \tag{8.2.6}$$

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\xi^*}\frac{\partial}{\partial\xi}A(\xi^*,\xi)&=-a_{12}\\ \frac{\partial}{\partial\xi}\frac{\partial}{\partial\xi^*}A(\xi^*,\xi)&=a_{12}\end{aligned}\right\}\tag{8.2.7}$$

由于$A(\xi^*,\xi)$是任意的函数，所以由(8.2.7)式可得

$$\left[\frac{\partial}{\partial\xi},\frac{\partial}{\partial\xi^*}\right]_+=0\tag{8.2.8}$$

(f) 和微分运算一样，对G函数定义积分也没有像普通数积分的那种对无限小区间上求和的意义，也是基于和普通数的积分法则相同的原则来定义积分法则. 这两个法则是：

(i) 当被积函数是全微分时，积分可积.

(ii) 这里考虑的积分对应于普通定积分和具有自然的边界条件(无穷远处为零的情形). 以一维的普通数的定积分为例，有

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}f=[f]_{-\infty}^{\infty}=0$$

根据上面的两个法则来看在G代数中的积分会是什么样的情况.

(iii) 先看普通数的G代数积分：

由前面的G代数微分知$\frac{\partial}{\partial\xi}(\xi)=1$. 对两端作$G$代数积分，得

$$\int\mathrm{d}\xi\frac{\partial}{\partial\xi}(\xi)=\int\mathrm{d}\xi\cdot 1$$

上式左端是一个全微分，按上面的两法则应当为零，右端也应为零，因此有

$$\int\mathrm{d}\xi\cdot 1=0\tag{8.2.9}$$

上式中的普通数1换为任何普通的数结果不变.

(iv) 当G代数ξ是被积分函数时，这时被积分函数不再是全微分，按以上的法则，它的G代数积分不为零并规定积分为1，即

$$\int\mathrm{d}\xi\xi=1\tag{8.2.10}$$

相应的还有

$$\int\mathrm{d}\xi^*\cdot 1=0\tag{8.2.11}$$

及

$$\int\mathrm{d}\xi^*\xi^*=1\tag{8.2.12}$$

注意，上面G代数积分中的$\int\mathrm{d}\xi$和$\int\mathrm{d}\xi^*$ 里 的 $\mathrm{d}\xi$,$\mathrm{d}\xi^*$并不是G函数. 它们和符号$\int$在一起构成G代数的一个运算记号.

(v) 现举几例.

例 1：

$$\int d\xi f(\xi)=\int d\xi(f_0+f_1\xi)$$
$$=f_0\int d\xi\cdot 1+f_1\int d\xi\cdot\xi=0+f_1\cdot 1=f_1$$

例 2：

$$\int d\xi A(\xi^*,\xi)=\int d\xi(a_0+a_1\xi+\overline{a_1}\xi^*+a_{12}\xi^*\xi)$$
$$=a_1+\overline{a_1}\xi^*\int d\xi\cdot 1-a_{12}(\int d\xi\xi)\xi^*$$
$$=a_1-a_{12}\xi^*$$

类似有

$$\int d\xi^* A(\xi^*,\xi)=\overline{a_1}+a_{12}\xi$$

例 3：

$$\int d\xi^* d\xi A(\xi^*,\xi)=\int d\xi^* d\xi(a_0+a_1\xi+\overline{a_1}\xi^*+a_{12}\xi^*\xi)$$
$$=\int d\xi^*(a_1-a_{12}\xi^*)=-a_{12}$$
$$=-\int d\xi d\xi^* A(\xi^*,\xi)$$

(vi) 定义 G 代数的 δ 函数

$$\delta(\xi,\xi')\equiv\int d\eta e^{-\eta(\xi-\xi')}$$
$$=\int d\eta[1-\eta(\xi-\xi')]$$
$$=-(\xi-\xi')$$

现在证明这样定义的 G 代数中的 δ 函数具有对应于普通 δ 函数的相同性质. 现在来看 G 代数中的任意函数 $f(\xi)=f_0+f_1(\xi)$ 和 G 代数中的 δ 函数乘积的积分

$$\int d\xi'\delta(\xi,\xi')f(\xi')=-\int d\xi'(\xi-\xi')(f_0+f_1\xi')$$
$$=-f_0\xi\int d\xi'\cdot 1+f_0\int d\xi'\cdot\xi'+\int d\xi'\cdot\xi'(f_1\xi)$$
$$=f_0+f_1\xi=f(\xi)$$

这正是和普通 δ 函数一样的性质.

(vii) 定义函数 $f(\xi)=f_0+f_1\xi$ 的共轭函数

$$f^*(\xi)=f_0^*+f_1^*\xi$$

则两个 G 代数函数

$$f(\xi)=f_0+f_1\xi,\quad g(\xi)=g_0+g_1\xi$$

的内积为

$$\begin{aligned}\langle f\mid g\rangle&=\int d\xi^*\,d\xi e^{-\xi^*\xi}f^*(\xi)g(\xi^*)\\&=\int d\xi^*\,d\xi(1-\xi^*\xi)(f_0^*+f_1^*\xi)(g_0+g_1\xi^*)\\&=\int d\xi^*\,d\xi(1-\xi^*\xi)(f_0^*g_0+f_1^*g_0\xi+f_0^*g_1\xi^*+f_1^*g_1\xi\xi^*)\\&=\int d\xi^*\,d\xi(f_0^*g_0+f_1^*g_0\xi+f_0^*g_1\xi^*+f_1^*g_1\xi\xi^*-f_0^*g_0\xi^*\xi+0+0+0)\\&=0+0+0+\int f_1^*g_1d\xi^*\xi^*+f_0^*g_0\int d\xi^*\xi^*\\&=f_0^*g_0+f_1^*g_1\end{aligned}\tag{8.2.13}$$

上式中的第四等式后应用了 $\xi^2=\xi^{*2}=0$ 的性质.

8.2.2 费米相干态

(a) 对于费米系统,在前面已谈过,如果要引入相干态$|\varphi\rangle$,要求 $a_\alpha=\xi_\alpha|\varphi\rangle$,则 ξ_α 必须是G 数. 另一方面,在 Fock 空间中任意一态矢总可以用粒子数表象来展开

$$|\psi\rangle=\sum_{n_{\alpha_1},n_{\alpha_2},\cdots}An_{\alpha_1}n_{\alpha_2}\cdots|n_{\alpha_1},n_{\alpha_2},\cdots\rangle$$

若用 a_α 作用到$|\psi\rangle$上时,就是 a_α 对各个态矢$|n_{\alpha_1},n_{\alpha_2},\cdots\rangle$作用,总不会出现$G$ 数,可见定义的费米相干态$|\varphi\rangle$和任意的物理空间的态矢$|\psi\rangle$都不会相同. 说得更明确一点,那就是费米相干态不属于物理的态矢空间. 那么,自然要问讨论费米相干态还有什么意义呢? 解释如下:

(i) 包括相干态在内的费米系统的态矢空间已经不局限于原有的物理态矢空间. 它是扩大了的态矢空间,物理的态矢空间只是它的一个子空间.

(ii) 在运算的过程中有可能更方便的做法是在这个扩大的态矢空间及扩大的数域中进行.

(iii) 计算的最后,必须用到这个扩大态矢空间中的物理态矢子空间的部分并和物理的测量联系起来.

这种情况和电工电子学中将实数物理量扩展为复数量进行运算,最后只取物理量的实数部分的运算处理类似.

(b) 由于G数也是一种反对易量,所以为了理论上的自洽性还应加上G数和费米算符之间的反对易关系

$$[\tilde{\xi},\tilde{a}]_+=0\tag{8.2.14}$$

其中记

$$\tilde{\xi}\sim[\xi_\alpha,\xi_\alpha^*],\quad\tilde{a}\sim[a_\alpha^+,a_\alpha]$$

(c) 费米相干态的表达式为

$$|\xi\rangle = \mathrm{e}^{-\sum_\alpha \xi_\alpha a_\alpha^+}|0\rangle = \prod_\alpha \mathrm{e}^{-\xi_\alpha a_\alpha^+}|0\rangle$$

$$= \prod_\alpha (1-\xi_\alpha a_\alpha^+)|0\rangle \tag{8.2.15}$$

上面的费米相干态表达式从第一等式来看和玻色相干态的形式一样,但却有实质的差别,因为 ξ_α 是 G 数而不是玻色相干态中的普通数 φ_α. 下面证明它的确满足要求的正确表达式.

(i) 先计算

$$a_\alpha(1-\xi_\alpha a_\alpha^+)|0\rangle = a_\alpha|0\rangle + \xi_\alpha a_\alpha a_\alpha^+|0\rangle$$
$$= \xi_\alpha a_\alpha a_\alpha^+|0\rangle = \xi_\alpha(1-a_\alpha^+ a_\alpha)|0\rangle = \xi_\alpha|0\rangle$$
$$= \xi_\alpha|0\rangle - \xi_\alpha^2 a_\alpha^+|0\rangle = \xi_\alpha(1-\xi_\alpha a_\alpha^+)|0\rangle$$

在上式中,利用了 $a_\alpha\xi_\alpha = -\xi_\alpha a_\alpha$ 及 $\xi_\alpha^2=0$. 在有了这个结果后继续计算下一步.

(ii) $a_\alpha|\xi\rangle = a_\alpha\prod_\beta(1-\xi_\beta a_\beta^+)|0\rangle = a_\alpha\left[\prod_{\beta\neq\alpha}(1-\xi_\beta a_\beta^+)\right](1-\xi_\alpha a_\alpha^+)|0\rangle$

$$= \left[\prod_{\beta\neq\alpha}(1-\xi_\beta a_\beta^+)\right]a_\alpha(1-\xi_\alpha a_\alpha^+)|0\rangle$$
$$= \left[\prod_{\beta\neq\alpha}(1-\xi_\beta a_\beta^+)\right]\xi_\alpha(1-\xi_\alpha a_\alpha^+)|0\rangle$$
$$= \xi_\alpha\left[\prod_{\beta\neq\alpha}(1-\xi_\beta a_\beta^+)\right](1-\xi_\alpha a_\alpha^+)|0\rangle$$
$$= \xi_\alpha\prod_\beta(1-\xi_\beta a_\beta^+)|0\rangle = \xi_\alpha|\xi\rangle$$

这样就证明了(8.2.15)式的费米相干态的正确性.

(d) 由

$$\begin{cases}|\xi\rangle = \mathrm{e}^{-\sum_\alpha \xi_\alpha a_\alpha^+}|0\rangle \\ a_\alpha|\xi\rangle = \xi_\alpha|\xi\rangle\end{cases} \tag{8.2.16}$$

取共轭,得

$$\begin{cases}\langle\xi| = \langle 0|\mathrm{e}^{-\sum_\alpha a_\alpha \xi_\alpha^*} = \langle 0|\mathrm{e}^{\sum_\alpha \xi_\alpha^* a_\alpha} \\ \langle\xi|a_\alpha^+ = \langle\xi|\xi_\alpha^*\end{cases} \tag{8.2.17}$$

(e) 费米相干态与玻色相干态有如下形式上相同的性质

$$a_\alpha^+|\xi\rangle = a_\alpha^+(1-\xi_\alpha a_\alpha^+)\prod_{\beta\neq\alpha}(1-\xi_\beta a_\beta^+)|0\rangle$$
$$= a_\alpha^+\prod_{\beta\neq\alpha}(1-\xi_\beta a_\beta^+)|0\rangle$$
$$= \left[-\frac{\partial}{\partial\xi_\alpha}(1-\xi_\alpha a_\alpha^+)\right]\prod_{\beta\neq\alpha}(1-\xi_\beta a_\beta^+)|0\rangle$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \xi_\alpha} \mid \xi\rangle \tag{8.2.18}$$

注意和对应的玻色相干态的情形相比，这里多了一个负号. 为了完整性，重写一次上面(ii)的导出结果

$$a_\alpha \mid \xi\rangle = \xi_\alpha \mid \xi\rangle \tag{8.2.19}$$

$$\begin{aligned}\langle \xi \mid a_\alpha &= \langle 0 \mid \Big[\prod_{\beta\neq\alpha}(1-\xi_\beta^* a_\beta)\Big](1-\xi_\alpha^* a_\alpha)a_\alpha \\ &= \langle 0 \mid \Big[\prod_{\beta\neq\alpha}(1-\xi_\beta^* a_\beta)\Big]a_\alpha \\ &= -\langle 0 \mid \Big[\prod_{\beta\neq\alpha}(1-\xi_\beta^* a_\beta)\Big]\frac{\partial}{\partial \xi_\alpha^*}(1-\xi_\alpha^* a_\alpha) \\ &= -\frac{\partial}{\partial \xi_\alpha^*}\langle 0 \mid \Big[\prod_{\beta\neq\alpha}(1-\xi_\beta^* a_\beta)\Big](1-\xi_\alpha^* a_\alpha) \\ &= -\frac{\partial}{\partial \xi_\alpha^*}\langle \xi \mid\end{aligned} \tag{8.2.20}$$

类似地，有

$$\langle \xi \mid a_\alpha^+ = \langle \xi \mid \xi_\alpha^+ \tag{8.2.21}$$

(f) 按照已有的 G 数运算法则可以导出两任意费米相干态的内积表示式

$$\begin{aligned}\langle \xi \mid \xi'\rangle &= \langle 0 \mid \mathrm{e}^{\sum\limits_\alpha \xi_\alpha^* a_\alpha}\mathrm{e}^{\sum\limits_\beta \xi_\beta' a_\beta^+} \mid 0\rangle \\ &= \langle 0 \mid \prod_{\alpha\beta}(1+\xi_\alpha^* a_\alpha)(1-\xi_\beta' a_\beta^+) \mid 0\rangle \\ &= \langle 0 \mid \prod_{\alpha\beta}(1+\xi_\alpha^* a_\alpha - \xi_\beta' a_\beta^+ + \xi_\alpha^* \xi_\beta' a_\alpha a_\beta^+) \mid 0\rangle \\ &= \langle 0 \mid \prod_{\alpha\beta}[1+\xi_\alpha^* \xi_\beta'(\delta_{\alpha\beta} - a_\alpha^+ a_\beta)] \mid 0\rangle \\ &= \langle 0 \mid \prod_{\alpha\beta}[\xi_\alpha^* \xi_\beta' \delta_{\alpha\beta} + 1] \mid 0\rangle \\ &= \langle 0 \mid 0\rangle \prod_\alpha (1+\xi_\alpha^* \xi_\alpha') = \prod_\alpha \mathrm{e}^{\xi_\alpha^* \xi_\alpha'} = \mathrm{e}^{\sum\limits_\alpha \xi_\alpha^* \xi_\alpha'}\end{aligned} \tag{8.2.22}$$

从得到的结果来看，费米相干态的内积的表达式在形式上和玻色相干态的内积表达式完全一样.

(g) 在玻色系统相干态的讨论中上曾讨论过封闭性关系. 表达封闭性关系的是一个由相干态完全集合组成的一个相当于单位算符的算符，把它插入任意两个态的矩阵元中后，则后者化为计算态与相干态的矩阵元的乘积. 这里要着重指出费米相干态的封闭性关系和玻色相干态之间重要的不同之处. 这里的封闭性关系

$$\int \prod_\alpha \mathrm{d}\xi_\alpha^* \,\mathrm{d}\xi_\alpha \,\mathrm{e}^{-\sum\limits_\alpha \xi_\alpha^* \xi_\alpha} \mid \xi\rangle\langle \xi \mid = 1 \tag{8.2.23}$$

只对物理态而言. 由于在这里已经把原来的物理的态矢空间扩充为既包含物理的态矢空间也包含非物理的费米相干态空间，因此我们要强调(8.2.23)式的封闭性

关系只针对两个物理态矢的矩阵元来说它才是相当于一个单位算符.只要两个态中有一个态矢是非物理的相干态,则(8.2.23)式不成立.下面的证明也是只对两个物理态来进行的.附带再说明一点,正是因为有(8.2.23)式的封闭性关系的这一特殊性质,才使得原本只是物理态矢空间的问题能在中间过程中把它带入包括费米态矢的更大空间去作运算,然后借助它再回归物理空间.

以下证明(8.2.23)式.

(i) 把(8.2.23)式左方的算符简记为 $\hat{A}$,则要证明的是对于任意两个物理态矢 $|\alpha_1,\cdots,\alpha_n\rangle$ 及 $|\beta_1,\cdots,\beta_m\rangle$,应有

$$\begin{aligned}\langle\alpha_1,\cdots,\alpha_n \mid \hat{A} \mid \beta_1,\cdots,\beta_m\rangle &= \langle\alpha_1,\cdots,\alpha_n \mid \hat{I} \mid \beta_1,\cdots,\beta_m\rangle \\ &= \langle\alpha_1,\cdots,\alpha_n \mid \beta_1,\cdots,\beta_m\rangle\end{aligned}$$

这里附带讲一下,由于是费米系统,$\alpha_1,\cdots,\alpha_n$ 应各不相同,$\beta_1,\cdots,\beta_m$ 也应各不相同.

(ii) 作为准备,先证明以下的关系

$$\begin{aligned}\langle\alpha_1,\cdots,\alpha_n \mid \xi\rangle &= \langle 0 \mid a_{\alpha_n},\cdots,a_{\alpha_1} \mid \xi\rangle \\ &= \xi_{\alpha_n}\cdots\xi_{\alpha_1}\langle 0 \mid \xi\rangle \\ &= \xi_{\alpha_n}\cdots\xi_{\alpha_1}\end{aligned} \tag{8.2.24}$$

其中用到

$$\langle 0 \mid \xi\rangle = \langle 0 \mid \mathrm{e}^{-\sum\limits_{\alpha}\xi_\alpha a_\alpha^+} \mid 0\rangle = \langle 0 \mid (1-\sum_\alpha \xi_\alpha a_\alpha^+) \mid 0\rangle = 1 \tag{8.2.25}$$

对(8.2.24)式取共轭,有

$$\langle\xi \mid \alpha_1,\cdots,\alpha_n\rangle = \xi_{\alpha_1}^*\cdots\xi_{\alpha_n}^* \tag{8.2.26}$$

在(8.2.24)~(8.2.26)式的基础上可以证明(8.2.23)式.

$$\begin{aligned}&\langle\alpha_1,\cdots,\alpha_n \mid \hat{A} \mid \beta_1,\cdots,\beta_m\rangle \\ &= \int\prod_\alpha \mathrm{d}\xi_\alpha^*\,\mathrm{d}\xi_\alpha \mathrm{e}^{-\sum\limits_\alpha \xi_\alpha^*\xi_\alpha}\langle\alpha_1,\cdots,\alpha_n \mid \xi\rangle\langle\xi \mid \beta_1,\cdots,\beta_m\rangle \\ &= \int\prod_\alpha \mathrm{d}\xi_\alpha^*\,\mathrm{d}\xi_\alpha \prod_\alpha(1-\xi_\alpha^*\xi_\alpha)\xi_{\alpha_n}\cdots\xi_{\alpha_1}\xi_{\beta_1}^*\cdots\xi_{\beta_m}^* \\ &= \prod_\alpha\int \mathrm{d}\xi_\alpha^*\,\mathrm{d}\xi_\alpha(1-\xi_\alpha^*\xi_\alpha)\xi_{\alpha_n}\cdots\xi_{\alpha_1}\xi_{\beta_1}^*\cdots\xi_{\beta_m}^*\end{aligned} \tag{8.2.27}$$

从(8.2.27)式看出,它是 α 取各个单粒子态时的积分之积.因此,我们看一下 $\alpha=\gamma$ 时的特定单粒子态的积分.这时可分为以下四种情形:

(1) 选定的 γ 态,$\alpha_1,\cdots,\alpha_n$ 及 $\beta_1,\cdots,\beta_m$ 中都没有,于是对(8.2.57)式中 ξ_γ 及 ξ_γ^* 的积分写为

$$\begin{aligned}\int \mathrm{d}\xi_\gamma^*\,\mathrm{d}\xi_\gamma(1-\xi_\gamma^*\xi_\gamma) &= -\int \mathrm{d}\xi_\gamma^*\,\mathrm{d}\xi_\gamma\xi_\gamma^*\xi_\gamma) \\ &= \int \mathrm{d}\xi_\gamma^*\,\mathrm{d}\xi_\gamma\xi_\gamma\xi_\gamma^* = \int \mathrm{d}\xi_\gamma^*\,\xi_\gamma^* = 1\end{aligned} \tag{8.2.28}$$

(2) $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$ 中含有 γ，$\beta_1, \cdots, \beta_m$ 中不含 γ. 于是对 ξ_γ 及 ξ_γ^* 的积分为

$$\int d\xi_\gamma^* \, d\xi_\gamma (1 - \xi_\gamma^* \xi_\gamma) \xi_\gamma = \int d\xi_\gamma^* \, d\xi_\gamma \xi_\gamma = \int d\xi_\gamma^* = 0 \qquad (8.2.29)$$

(3) $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$ 中不含 γ，$\beta_1, \cdots, \beta_m$ 中含有 γ，于是对 ξ_γ 及 ξ_γ^* 的积分为

$$\int d\xi_\gamma^* \, d\xi_\gamma (1 - \xi_\gamma^* \xi_\gamma) \xi_\gamma^* = \int d\xi_\gamma^* \, d\xi_\gamma \xi_\gamma^* = -\int d\xi_\gamma = 0 \qquad (8.2.30)$$

(4) $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$ 中含有 γ，$\beta_1, \cdots, \beta_m$ 也含有 γ，这时有

$$\int d\xi_\gamma^* \, d\xi_\gamma (1 - \xi_\gamma^* \xi_\gamma) \xi_\gamma^* \xi_\gamma = \int d\xi_\gamma^* \, d\xi_\gamma \xi_\gamma \xi_\gamma^* = \int d\xi_\gamma^* \xi_\gamma^* = 1 \qquad (8.2.31)$$

当我们进行完所有的 ξ_γ 及 ξ_γ^* 的积分时，只要有一个 γ 是 $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$ 和 $\beta_1, \cdots, \beta_m$ 两者中一个包含而另一个不包含的，那么对该 γ 的积分就为零. 总的积分因其一个因子为零而为零. 总的积分要不为零，只有 $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$ 及 $\beta_1, \cdots, \beta_m$ 中要么都包含某一 γ，要么都不包含某一 γ. 这样一来，一定有 $m = n$ 且 $\beta_1, \cdots, \beta_n$ 只不过是 $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$ 的某种置换时总积分才不为零，而且这时对每一个 γ 的积分都是 1，总的积分自然也是 1. 不过 $\beta_1, \cdots, \beta_n$ 是 $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$ 的不同置换时多出一个 $(-1)^p$，p 指的是该置换. 于是，最后有

$$\langle \alpha_1, \cdots, \alpha_n \mid \hat{A} \mid \beta_1, \cdots, \beta_m \rangle = (-1)^p \delta_{mn} \qquad (8.2.32)$$

另一方面，直接计算两个物理量态矢的矩阵元

$$\langle \alpha_1, \cdots, \alpha_n \mid \beta_1, \cdots, \beta_m \rangle = \langle 0 \mid a_{\alpha_1} \cdots a_{\alpha_n} a_{\beta_n}^{+} \cdots a_{\beta_1}^{+} \mid 0 \rangle = (-1)^p \delta_{mn} \qquad (8.2.33)$$

比较(8.2.32)及(8.2.33)式，右方相等，故左方也相等，于是(8.2.23)式得以证明.

如上所述，有了(8.2.29)式的封闭关系，我们就能进入包括费米态矢的相干态子空间去做中间的运算并借助它回归物理的结果. 这样，费米相干态的作用就清楚了. 本书不再继续讨论它的应用案例.

参考书目

[1] Dirac P A M. 量子力学原理. 陈咸亨，译. 北京：科学出版社，1979.

[2] Schiff L I. 量子力学. 李淑娴，陈崇光，译. 北京：高等教育出版社，1982.

[3] 曾谨言. 量子力学. 北京：科学出版社，1986.

[4] Fetter A L，Walecka J D. 多粒子系统的量子理论. 陈俊文，孙景李，梁昆淼，译. 北京：科学出版社，1984.

[5] 喀兴林. 高等量子力学. 北京：高等教育出版社，2000.

[6] 范洪义. 量子力学表象与变换论. 上海：上海科学技术出版社，1992.

[7] Negele J W，Orland H. Quantum Many-Particle Systems. New York：Perseus Books Publishing L. L. C.，1998.

[8] Mahan G D. Many-Particle Physics. New York and London：Plenum Press，1990.



《现代物理基础丛书》已出版书目

（按出版时间排序）

1. 现代声学理论基础　马大猷 著　2004.03
2. 物理学家用微分几何（第二版）　侯伯元，侯伯宇 著　2004.08
3. 数学物理方程及其近似方法　程建春 编著　2004.08
4. 计算物理学　马文淦 编著　2005.05
5. 相互作用的规范理论（第二版）　戴元本 著　2005.07
6. 理论力学　张建树，等 编著　2005.08
7. 微分几何入门与广义相对论（上册·第二版）　梁灿彬，周彬 著　2006.01
8. 物理学中的群论（第二版）　马中骐 著　2006.02
9. 辐射和光场的量子统计　曹昌祺 著　2006.03
10. 实验物理中的概率和统计（第二版）　朱永生 著　2006.04
11. 声学理论与工程应用　朱海潮，等 编著　2006.05
12. 高等原子分子物理学（第二版）　徐克尊 著　2006.08
13. 大气声学（第二版）　杨训仁，陈宇 著　2007.06
14. 输运理论（第二版）　黄祖洽 著　2008.01
15. 量子统计力学（第二版）　张先蔚 编著　2008.02
16. 凝聚态物理的格林函数理论　王怀玉 著　2008.05
17. 激光光散射谱学　张明生 著　2008.05
18. 量子非阿贝尔规范场论　曹昌祺 著　2008.07
19. 狭义相对论（第二版）　刘　辽，等 编著　2008.07
20. 经典黑洞与量子黑洞　王永久 著　2008.08
21. 路径积分与量子物理导引　侯伯元，等 著　2008.09
22. 量子光学导论　谭维翰 著　2009.01
23. 全息干涉计量——原理和方法　熊秉衡，李俊昌 编著　2009.01
24. 实验数据多元统计分析　朱永生 编著　2009.02
25. 微分几何入门与广义相对论（中册·第二版）　梁灿彬，周彬 著　2009.03
26. 中子引发轻核反应的统计理论　张竞上 著　2009.03
27. 工程电磁理论　张善杰 著　2009.08